

Forschungszentrum Jülich



Institut für Grenzflächenforschung
und Vakuumphysik

***Exploration der Grenzen der
funktionalen Modifikation dünner
magnetischer Schichten***

Bernd Schirmer

Jül-3641

Exploration der Grenzen der funktionalen Modifikation dünner magnetischer Schichten

Bernd Schirmer

Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3641
ISSN 0944-2952
Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik Jül-3641
D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
☎ 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · e-mail: zb-publikation@fz-juelich.de

Exploring the limits of functional modification of thin magnetic films

Novel properties and new applications have lead to a tremendous increase of the importance of thin films. In particular thin magnetic films have recently gained considerable interest. Such films show new phenomena such as giant magneto- resistance and oscillatory exchange coupling which enable new devices and applications. The significance of these effects is likely to increase in the future and with it the complexity of devices. Further improvements focus on the tailoring of thin films. To achieve this goal a deeper understanding of the interaction between structural and magnetic properties is essential. Unfortunately the sequence of layers in present magnetic sensor heads is too complex to isolate the influence of a specific interface. So the only promising approach to understand the different interface interactions is the usage of a model system. Depending on the specific aim of the investigation several systems can serve as a model. The aim of this work was to develop a thermodynamical model to describe the structural and magnetical properties of thin films. To develop this model the influence of epitaxial strain on the structure of thin films (Fe/Cu₃Au(100) and Mn/Cu₃Au(100)) was investigated first. In a second step the influence of a magnetic interface on the structure of a metastable film was investigated. In this case Fe/Ni/Cu(100) was chosen as a model system.

Low- energy- electron diffraction I(V) measurements and full- dynamical I(V) calculations were used to determine the structure and magneto- optical- Kerr- effect measurements the magnetism of the model systems was investigated.

The analysis of 3.3, 4.8, 18.7 and 53 ML thick films for the Fe/Cu₃Au system showed that all films have a non- pseudomorphic, tetragonally distorted structure. By a strain analysis this tetragonal distorted structures were identified as tetragonal distorted bcc structures. This structure analysis is in agreement with the prediction of the thermodynamic model.

With the analysis of the structure of a 5.2 ML thick Mn film on Cu₃Au(100) it was shown that Mn/Cu₃Au(100) has two pseudomorphic structures as a function of the film thickness. It was shown that the structure of the 16 ML thick Mn film could be attributed to a tetragonally distorted equilibrium structure for thin Mn films. A comparison with the thermodynamical model shows that the structure of the 5.2 and the 16 ML thick Mn film could not be understood by this model so far. So Mn thin films remain a mystery until further investigation of their elastical properties.

To investigate the influence of a magnetic interface the Fe/Cu(100) system was mo-

dified by a pseudomorphic 7 ML thick Ni interlayer. The structural investigation of this system between 1 and 10 ML Fe showed that the structural properties are barely affected by the magnetic interface small derivations occur for thicknesses between 2.5 and 5 ML. In this thickness range a continuous transition of two fcc phases was found in contrast to the Fe/Cu(100) system. For the magnetic properties a various differences between both systems could be observed which could be attributed to the influence of the magnetic interlayer. The most important changes is the appearance of an exchange anisotropy field. This field is particularly pronounced between 2.5 and 4 ML. A second ferromagnetically ordered layer in the Fe film in the thickness range between 5 and 10 ML was found. The two ferromagnetically ordered films couple at low temperatures up to 240 K antiparallel.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	3
2.1	Wachstum und Struktur dünner Filme	3
2.1.1	Gleichgewichts-Thermodynamik	4
2.1.2	Nichtgleichgewichts Thermodynamik (Kinetik)	7
2.2	Magnetismus dünner Filme	10
2.3	Wechselbeziehung zwischen Struktur und Magnetismus	13
2.4	Erweitertes Beschreibungsmodell	15
2.5	Referenzsystem Fe/Cu(001)	18
3	Experimentelle Methoden	21
3.1	Die Apparatur	21
3.2	Präparation	24
3.3	MOKE	26
3.4	LEED	33
4	Dünne Eisenfilme auf Cu₃Au	37
4.1	Wachstum und Morphologie	38
4.2	Struktur	40

4.2.1	Rechnungen	40
4.2.2	Einordnung und Diskussion	48
4.2.3	Fazit	61
5	Struktur von dünnen Manganfilmen auf Cu_3Au	63
5.1	Wachstum und Morphologie	64
5.2	Struktur	64
5.2.1	Rechnungen	67
5.2.2	Einordnung und Diskussion	71
5.3	Fazit	82
6	Dünne Eisenfilme auf einem Ni/Cu(100)-Substrat	85
6.1	Wachstum und Morphologie	87
6.2	Struktur	92
6.2.1	(4x1)-Phase	100
6.2.2	(2x1)pm2g-Phase	105
6.2.3	Fazit	110
6.3	Magnetismus	112
6.3.1	Ergebnisse	112
6.3.2	Einordnung und Diskussion	130
6.4	Fazit	140
7	Zusammenfassung	145
A	Magnetische Kopplung	149
A.1	Grenzflächenaustauschkopplung	150
A.2	Zwischenschichtaustauschkopplung	151

B MOKE-Versuch	153
B.1 Fehlerbetrachtung	154
B.1.1 Lichtquelle	155
B.1.2 Optik (Polarisatoren)	155
B.1.3 Verstelleinheiten (Drehversteller)	156
B.1.4 Signalverarbeitende Elektronik	157
B.2 Realsierung und Diskussion	158

Tabellenverzeichnis

2.1	Daten der Grunzustände für Mn und Fe aus Totalenergieberechnungen	15
2.2	Darstellung der Differenzen verschiedener Modifikationen in den Beiträgen zur Freien Energie	17
4.1	Strukturdaten der Fe- Filme auf Cu ₃ Au	44
4.2	Elastische und strukturelle Daten der Fe- Grundzustände	50
5.1	Strukturdaten der 5,2 und 16 ML Mn- Filme	69
5.2	Strukturdaten für Volumen Mn- Legierungen	76
6.1	Vergleich der Strukturdaten für 2 ML dicke Filme	103
6.2	Strukturdaten des 6 ML Fe/Ni/Cu(100)- Films	107
6.3	Vergleich der Strukturdaten für 6 ML dicke Filme	110

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung der Wachstumsmoden	5
2.2	Homo- und heteroepitaktisches Wachstum	6
2.3	Wachstum dünner Schichten	8
2.4	Magnetische Phasen von Fe in Abhängigkeit des atomaren Volumens .	14
2.5	Modell des Referenzsystems Fe auf Cu(001)	19
3.1	Skizze der oberen Apparaturebene	22
3.2	Skizze des LEED I(V)- Aufnahmesystems	23
3.3	Augereichung	25
3.4	Kerr- Effekt	26
3.5	MOKE-Geometrien	27
3.6	Schematische Darstellung des verwendeten Versuchsaufbaus	28
3.7	MOKE-Messung bei 110 K	30
3.8	MOKE-Messung bei 300 K	32
3.9	3-Gitter- LEED-Optik	33
3.10	Informationinhalt von LEED	36
4.1	Stabilisierung von kfz- und krz- Strukturen auf einer kfz(001) Oberfläche	38
4.2	Fe-Struktur in Abhängigkeit vom Substrat	39
4.3	LEED Bilder für dünne Fe Schichten auf Cu ₃ Au	41

4.4	LEED I(V)-Kurven des 53 ML Fe/Cu ₃ Au Films	43
4.5	LEED I(V)-Kurven des 18,7 ML dicken Fe/Cu ₃ Au Films	45
4.6	LEED I(V)-Kurven des 4,8 ML dicken Fe/Cu ₃ Au Films	46
4.7	LEED I(V)-Kurven des 3,3 ML dicken Fe/Cu ₃ Au Films	47
4.8	Abhängigkeit der R_p -Fraktoren von den Strukturparametern	49
4.9	Vergleich der verschiedenen Modell für den (0,0)-Reflex der 3,3 ML Schicht	52
4.10	Vergleich der experimentellen I(V) Kurven mit dem Kfz Modell für den 3,3 ML Film	54
4.11	Darstellung der epitaktischen Linien der verschiedenen Strukturmodelle	56
4.12	Vergleich der epitaktischen Linien mit den Oberflächenstrukturen . . .	57
4.13	Atomare Volumen der Fe-Schichten	59
4.14	Elastische Energien verschiedener Fe-Phasen	60
5.1	LEED- Bilder Mn/Cu ₃ Au	65
5.2	LEED I(V)- Kurven für verschiedene Mn-Schichtdicken	66
5.3	Vergleich der I(V)- Kurven für den 5,2 ML dicken Mn- Film	68
5.4	Einfluß der Variation der Strukturparameter auf R_p	70
5.5	Einfluß von Cu und Au Beimengungen	71
5.6	d_b gegen a_p Diagramm für dicke Mn-Filme	73
5.7	c/a-Verhältnisse der Volumenlagen	74
5.8	Volumen der Mn-Volumenlagen	79
5.9	Strukturdaten der dünnen Mn-Schichten	80
5.10	c/a-Verhältnis gegen Volumen Diagramm für Mn- Filme	81
6.1	Augerversuche zur Diffusion von Ni in den Fe-Film	88
6.2	MEED Kurve für Ni auf Cu(100)	89
6.3	MEED Kurven für das Wachstum verschiedener Fe-Systeme	91

6.4	LEED Bilder der verschiedenen Strukturen	93
6.5	LEED-Bilder im Übergangsbereich von (4x1) zur (2x1)pm2g Phase . .	94
6.6	Übersicht über Linienscans im Fe- Schichtdickenbereich von 2,1 bis 5,0 ML	97
6.7	Intensitäten der (4x1) und der (2x1)- Überstruktureflexe im Übergangsbereich	98
6.8	Intensität der (4x1) und der (2x1)- Überstruktureflexe für den getemperten Film	99
6.9	Darstellung zur Bestimmung der Überstrukturintensität der(4x1)-Struktur	101
6.10	Roh LEED I(V)-Kurve für den (1,1/4) Reflex	102
6.11	LEED I(V)- Kurven der Überstruktureflexe der (4x1)Struktur	103
6.12	Vergleich der LEED I(V)- Kurven für den 2,3 ML dicken Fe- Film . . .	104
6.13	Realraumstrukturmodell der (2x1)pm2g-Phase	106
6.14	Vergleich der LEED I(V)-Kurven für den 6 ML Fe-Film	108
6.15	Abhängigkeit des Pendry R-Faktors von den strukturellen Parametern .	109
6.16	Strukturelles Modell der Fe-Phasen auf Ni/Cu(100)	111
6.17	MOKE-Messung für einen 7 ML Ni-Film	113
6.18	Hysteresekurven für Fe/Ni/Cu(001)	115
6.19	M_s und H_c gegen d-Kurven im Schichtdickenbereich bis zu 10 ML Fe . .	117
6.20	M_s , H_c und H_f gegen d Kurven für den Bereich von Phase I und Phase II	119
6.21	M_s und H_c gegen T-Diagramm für einen 5,3 ML Fe-Film	121
6.22	Hysteresekurven für den 5,3 ML Fe-Film in Abhängigkeit von der Temperatur	122
6.23	M_s , H_c und H_f gegen T-Diagramm für einen 3,2 ML Fe-Film	123
6.24	Hysteresekurven für den 3,2 ML Fe-Film in Abhängigkeit von der Temperatur	124
6.25	M_s , H_c und H_f für ein System mit einem geheiztem Ni-Film	126

6.26	M_s und H_c für den Übergang von Phase II nach Phase III	128
6.27	Hysteresekurven im Fe-Schichtdickenbereich zwischen 5,7 und 10 ML für die 300 K-Messung	130
6.28	Vergleich der M_s -Kurven von Fe/Cu und Fe/Ni/Cu mit der H_f -Kurve und den LEED-Überstruktureflexen im Bereich des Übergangs von der (4x1) zur (2x1)pm2g-Phase	132
6.29	Verschiedene Modelle zur Beschreibung der M_s -Kurve für das Fe/Ni/Cu(001)-System	134
6.30	Modell der Temperaturabhängigkeit des 5,3 ML dicken Films	138
6.31	Modell für die Struktur und den Magnetismus des Systems Fe auf 7 ML auf Cu(001)	141

Kapitel 1

Einleitung

Die Bedeutung dünner Schichten ist in den letzten Jahren aufgrund ihrer spezifischen Eigenschaften enorm gestiegen. Der vielseitige Einsatz von dünnen Schichten in modernen Technologien geht einher mit einer immer intensiveren Erforschung und damit einem besseren Verständnis der physikalischen Grundlagen der Eigenschaften dünner Filme. Bei der Untersuchung der Eigenschaften dünner Schichten hat es sich gezeigt, daß es sich für die Physik nicht nur um ein überaus lohnendes sondern auch um ein gleichermaßen faszinierendes Feld handelt. Dünne Schichten zeigen gegenüber Volumenmaterialien stark veränderte und neuartige Eigenschaften.

Aus technologischer Sicht hat sich dabei neben der Halbleiterforschung die Erforschung magnetischer Eigenschaften dünner Filme als weiteres großes Arbeitsfeld etabliert. Dies wurde durch die Entdeckung des Riesenmagnetowiderstandes und seiner vielseitigen technischen Einsetzbarkeit ausgelöst [1]. Es hat sich gezeigt, daß für eine Optimierung und ein Verständnis dieser und verwandter Effekte zwingend notwendig ist, definiert dünne Schichtsysteme mit maßgeschneiderten magnetischen Eigenschaften herstellen zu können.

Dies setzt nicht nur voraus, daß man in der Lage ist Prozeßparameter bei der Herstellung der Schichtsysteme zu kontrollieren. Vielmehr ist es wünschenswert, Schichtsysteme auf eine spezielle Anwendung hin zu planen. Dazu ist es allerdings auch erforderlich, einzelne funktionale Eigenschaften (magnetische und strukturelle) solcher Systeme gezielt modifizieren zu können. Frühere Studien haben gezeigt, daß bei dünnen magnetischen Schichten der Zusammenhang zwischen einzelnen Eigenschaften - insbesondere zwischen magnetischen und strukturellen - noch weitaus komplizierter ist als bei nicht-

magnetischen Systemen.

Hier setzt nun diese Arbeit an. Ziel dieser Arbeit war es, anhand von verschiedenen magnetischen Systemen ein einfaches thermodynamisches Modell zur Beschreibung der funktionalen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten zu testen. Ein solches Modell würde, wenn es die Grenzen der funktionalen Modifizierbarkeit dünner magnetischer Schichten richtig beschreibt, ein geeignetes Hilfsmittel zum Design magnetischer Schichtsysteme darstellen. Bei den Untersuchungen sollte insbesondere geprüft werden, ob dieses Modell die strukturelle und magnetische Modifizierung von magnetischen Systemen beschreiben kann und wo die Grenzen des Modells in der jetzigen Form liegen. Die Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut:

In Kapitel 2 werden die Grundlagen einer thermodynamischen Beschreibung des Wachstums dünner magnetischer Schichten erläutert. Darauf aufbauend wird das thermodynamische Beschreibungsmodell der funktionalen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten und ein Referenzsystem (Fe/Cu(001)) für die weiteren Untersuchungen vorgestellt.

In Kapitel 3 folgt eine kurze Beschreibung der verwendeten Apparatur, der Vorgehensweise bei der Präparation der untersuchten Systeme und der hauptsächlich für die strukturelle und magnetische Charakterisierung verwendeten Methoden.

Bisher wurde angenommen, daß die elastische Verspannung für die Strukturbildung auch von dünnen magnetischen Schichten von ausschlaggebender Bedeutung sind. Dieses Konzept wird anhand des Systems Fe auf Cu_3Au in Kapitel 4 kritisch beleuchtet. Auch wird in Kapitel 4 getestet inwieweit das System durch das in Kapitel 2 vorgestellte thermodynamische Modell beschrieben werden kann.

Mangan-Schichten stellen in den letzten Jahren aufgrund ihrer Eigenschaften eine besondere Herausforderung für experimentelle Studien und die Überprüfung theoretischer Konzepte dar. Daher werden in Kapitel 5 die Ergebnisse von Studien zum System Mn auf Cu_3Au vorgestellt und gezeigt wo die Schwierigkeiten bei der Beschreibung dieses Systems liegen.

In Kapitel 6 wird das Fe/Ni/Cu(001)- System sowohl strukturell als auch magnetisch charakterisiert. Das Ziel ist dabei zu prüfen, welchen Einfluß eine gezielte Modifikation durch eine pseudomorphe 7 ML Ni- Schicht auf die aus dem Fe/Cu- System bekannten kfz- Strukturen hat.

Die Ergebnisse werden in Kapitel 7 zusammengefaßt.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel wird eine Einführung in die Grundlagen einer thermodynamischen Beschreibung des Wachstums, der strukturellen und magnetischen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten gegeben. Darauf aufbauend wird ein erweitertes thermodynamisches Beschreibungsmodell der strukturellen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten vorgestellt.

Den Anfang bilden die Konzepte zur Beschreibung des Wachstums dünner Schichten. Danach werden die verschiedenen magnetischen Beiträge zur Freien Energie erläutert und hierbei insbesondere die spezifischen Beiträge dünner Schichten herausgearbeitet. Weiterhin wird gezeigt, daß es eine enge Verknüpfung zwischen Struktur und Magnetismus von 3d- Übergangsmetallen gibt. Aufbauend darauf wird ein erweitertes Konzept zur thermodynamischen Beschreibung der strukturellen und magnetischen Eigenschaften dünner magnetischer Filme gegeben. Die Prüfung dieses Konzeptes bildet die Grundlage der in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen. Abschließend wird mit Fe/Cu(001) ein magnetisches Dünnschichtsystem vorgestellt, daß für zwei von drei untersuchten Systemen als Referenz verwendet wird. Dies sind Fe/Cu₃Au(100) in Kapitel 4 und Fe/Ni/Cu(100) in Kapitel 6.

2.1 Wachstum und Struktur dünner Filme

Die Morphologie von Grenz- und Oberflächen und die Struktur dünner Filme ist von einer Vielzahl von Parametern abhängig. Dazu zählen z.B. die Filmdicke, die Tempe-

ratur während des Wachstums, die Bindungsenergien zwischen den Adsorbatatomen, die Kristallstrukturen und die Gitterkonstanten von Substrat und Adsorbat. Eine im Hinblick auf die physikalischen Eigenschaften gezielte und reproduzierbare Herstellung von dünnen Schichten erfordert ein detailliertes Wissen über das Zusammenwirken der einzelnen Parameter. Um dies erreichen zu können, bedarf es einer Entwicklung von physikalischen Modellen und Theorien, die das Wachstum und die Strukturbildung von dünnen Filmen beschreiben können. Als eine Basis für derartige Modelle bietet sich die Thermodynamik an. Hier lassen sich zwei Bereiche unterscheiden: die Gleichgewichts-Thermodynamik, sowie die Nichtgleichgewichts-Thermodynamik. Die Verfahren der Gleichgewichts-Thermodynamik, d.h. insbesondere das Kriterium der Minimierung der Freien Energie, eignen sich besonders zur Beschreibung von stationären Zuständen wie z.B. kristallinen Strukturen. Die Behandlung von Nichtgleichgewichtssystemen ist mathematisch weitaus komplexer. Mit den hierfür entwickelten Methoden kann man allerdings die Prozesse sehr gut beschreiben, die während des Wachstums der dünnen Filme vonstatten gehen. Die Anwendung beider Bereiche zur Beschreibung dünner Schichten wird im Folgendem vorgestellt.

2.1.1 Gleichgewichts-Thermodynamik

Die Beschreibung des Wachstums und der Struktur dünner Filme ist am genauesten und einfachsten für ideale Systeme möglich. Daher werden sehr häufig die experimentellen und theoretischen Studien mit einkristallinen Substraten durchgeführt. Für das Wachstum im Gleichgewicht steht mit dem sogenannten Bauer-Kriterium [2] ein Maß zur Verfügung, mit dem man das Auftreten der verschiedenen möglichen Wachstumsmoden beschreiben kann. Diesem Kriterium liegt die Idee zugrunde, daß in der Nähe des Gleichgewichts das Wachstum durch das Minimum der Freien Energiedichten von Substratoberfläche, Adsorbatoberfläche und der Grenzfläche zwischen ihnen bestimmt wird [3]. In Abb. 2.1 sind die drei Wachstumsmoden dargestellt, die nach dem Bauer-Kriterium möglich sind. Man unterscheidet zwischen einem schichtweisen Wachstum (Frank- van der Merwe Wachstum) mit einer vollständigen Benetzung, einem drei-dimensionalen Wachstum (Vollmer- Weber Wachstum) ohne Benetzung und einem gemischten Wachstum mit partieller Benetzung bei dem eine oder mehrere Lagen schichtweise und die weiteren drei-dimensional aufwachsen (Stranski- Krastanov Wachstum). Dabei lautet nach dem Bauer-Kriterium die Bedingung für das Frank-

van der Merwe Wachstum:

$$\gamma_g + \gamma_a < \gamma_s \quad (2.1.2.1)$$

Hierbei bezeichnet γ_g die Freie Energie der Grenzfläche, γ_a die Freie Energie der Adsorbatoberfläche und γ_s die Freie Energie der Substratoberfläche. Die Voraussetzung für das Bauer- Kriterium ist, daß die Schichten spannungsfrei aufwachsen können. Dies ist der Fall, wenn Substrat und Adsorbat chemisch identisch sind (Homoepitaxie). Wenn Substrat und Adsorbat chemisch verschieden sind ist dies nicht der Fall; ein solches Wachstum wird Heteroepitaxie genannt. Bei der Heteroepitaxie muß zusätzlich die elastische Verspannungsenergie und damit im Bauer- Kriterium ein weiterer Term ($\frac{1}{2} * d * c_{eff} \epsilon^2$) betrachtet werden. ϵ ist die Gitterfehlanelanpassung (Misfit) zwischen Adsorbat und Substrat. Sie ist folgendermaßen definiert: $\epsilon = (a_s - a_a)/a_a$ (a_a ist der nächste Nachbarabstand des Adsorbats in der Ebene und a_s der des Substrats). d ist die Dicke der Schicht und c_{eff} das effektive Elastizitätsmodul. So ergibt sich nun die folgende Variation des Bauer-Kriteriums [3]:

$$\gamma_g + \gamma_a + \frac{1}{2} * d * c_{eff} \epsilon^2 < \gamma_s \quad (2.1.2.2)$$

Der zusätzliche Beitrag durch die Verspannungsenergie ist proportional zur Schichtdicke. Dieses führt dazu, daß es ab einer kritischen Schichtdicke energetisch günstiger ist, daß die Schicht in drei- dimensionalen Inseln weiterwächst. Alternativ dazu kann die Verspannungsenergie durch Versetzungen abgebaut werden. Ein solches verspanntes Wachstum bis zur kritischen Schichtdicke nennt man pseudomorph. Unter Berücksichtigung von Oberflächenverspannungseffekten ergibt sich für die Bestimmung

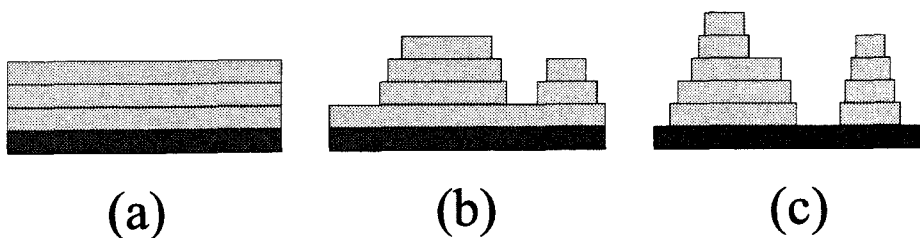


Abbildung 2.1: Die drei verschiedenen Wachstumsmoden beim Wachstum im Gleichgewicht für eine mittlere Bedeckung von einigen wenigen Atomlagen. (a) zeigt das Frank- van der Merwe Wachstum, (b) das Stranski- Krastanov Wachstum und (c) das Volmer- Weber Wachstum (hell: Adsorbat, dunkel: Substrat).

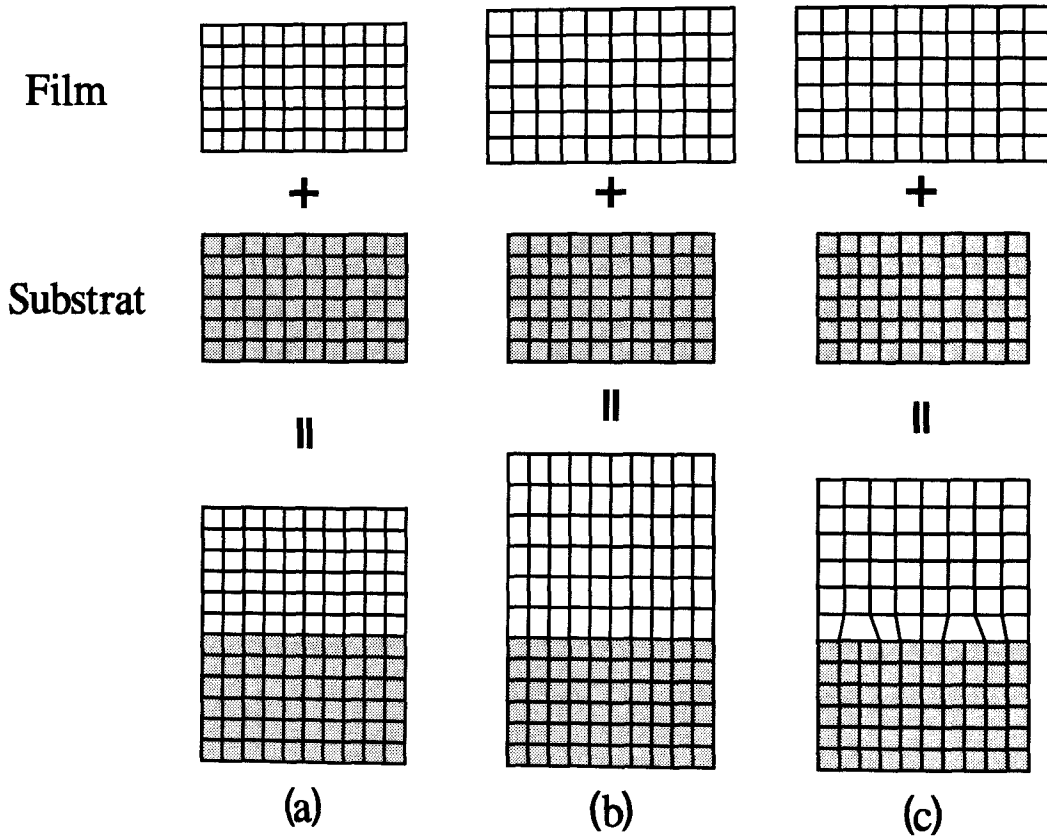


Abbildung 2.2: Die drei Phasen des epitaktischen Wachstums (a) homoepitaktisches Wachstum (kein Misfit, daher keine Verspannungen), (b) pseudomorphes, heteroepitaktisches Wachstum (Film wird durch das Substrat tetragonal verzerrt) und (c) relaxiertes, heteroepitaktisches Wachstum (Versetzungen bauen die Verspannungsenergie ab, Film wächst mit eigenen Gitterparametern)[4].

der kritischen Adsorbatschichtdicke d_c die folgende Formel [5, 6]:

$$d_c = \left(\frac{G_a * G_s}{G_a + G_s} \frac{b}{\pi(1 - \nu)} \left[\ln\left(\frac{d_c}{r}\right) + 1 \right] \pm 2 * f \right) / 2 * Y * |\epsilon| \quad (2.1.2.3)$$

Y ist das biaxiale Modul mit $Y = \hat{E}/(1 - \nu)$, \hat{E} ist das Youngsche Modul, ν das Poisson-Verhältnis, G_a das Schermodul des Adsorbats, G_s das Schermodul des Substrats, b der Betrag des Burgersvektors, r der Radius der Versetzung und f die resultierende Oberflächenverspannung. f ist als eine positive Größe definiert. Eine Stauchung oder Dehnung wird durch das Vorzeichen vor dem f dargestellt. Die Unterschiede zwischen den drei Möglichkeiten des Wachstums von Adsorbatschichten sind in Abb. 2.2 dargestellt.

Wie in (b) und (c) gezeigt, hat der Unterschied zwischen dem pseudomorphen und dem relaxierten, heteroepitaktischen Wachstum Einfluß auf die Struktur des Adsorbatfilms. So kommt es im pseudomorphen Bereich des heteroepitaktischen Wachstums zu tetragonalen Verzerrungen. Zur Quantifizierung der potentiellen Energie, die sich aus der Verzerrung des Adsorbatfilms ergibt, ist auf der Grundlage einer elastischen Theorie von Jona und Marcus [7, 8] die folgende Formel abgeleitet worden. Sie gilt für den Fall, daß die elastischen Module konstant sind und die Gitterfehlانpassung klein ist:

$$\frac{\delta E}{V_{eq}} = \frac{B}{2} \left(\frac{\delta V}{V_{eq}} \right)^2 + \frac{2G}{3} \left(\frac{\delta \left(\frac{c}{a} \right)}{\frac{c_{eq}}{a_{eq}}} \right)^2 \quad (2.1.2.4)$$

Mit dem Volumen-Modul B , dem Schermodul G , V_{eq} ist das Volumen pro Atom der Gleichgewichtsstruktur, a ist der nächste Nachbarabstand in der Ebene und c der doppelte Abstand zweier Atomlagen (die Größen beschreiben jeweils das Adsorbat). E ist die potentielle Energie und V das Volumen pro Einheitszelle. δE und δV beschreiben die Abweichungen von der Gleichgewichtslage, die durch die tetragonale Verzerrung erzeugt werden, und der Index eq beschreibt die Gleichgewichtslage. Die Formel gilt nur für einen tetragonal-verzerrten krz Film. Auch haben Marcus und Jona auf den gleichen Annahmen basierend ein Modell entwickelt, daß beschreibt, wie sich das Achsenverhältnis und damit die tetragonale Verzerrung in Abhängigkeit von den elastischen Konstanten des Films verändert. Dies eignet sich insbesondere zur Beschreibung der tetragonalen Verzerrung im Bereich des pseudomorphen Wachstums.

$$\frac{c}{c_{eq}} = \left(\frac{a}{a_{eq}} \right)^{-\gamma} \quad (2.1.2.5)$$

Die Nomenklatur ist mit der für die vorherige Gleichung identisch. Für γ gilt: $\gamma = \frac{2\nu}{1-\nu}$. Weiterhin ist zu beachten, daß es durch das Wachstum von mehreren übereinander liegenden dünnen Filmen zu einer komplexeren Beeinflußung der Morphologie und der Struktur kommen kann. Bei solchen Mehrlagenschichtsystemen ist der Misfit und die Grenzflächenenergie zwischen den einzelnen Schichten zu berücksichtigen. So könnte sich z.B. die kritische Schichtdicke des Gesamtsystems ändern [5].

2.1.2 Nichtgleichgewichts Thermodynamik (Kinetik)

Das Schichtwachstum und die Diffusion sind Nichtgleichgewichtsprozesse. Daher hat die Beschreibung von Nichtgleichgewichtsphänomenen eine große Bedeutung für die

Beschreibung des Wachstums und der Struktur dünner Filme. Hierbei sind kinetische Aspekte von entscheidender Bedeutung. In Abb. 2.3 sind qualitativ einige Aspekte des Wachstums skizziert. In den ersten Phasen des Wachstums (I) diffundieren einzelne Adatome frei auf der Substratoberfläche, in der zweiten Phase (II) bilden die Adsorbatteilchen Keime, die durch die Anlagerung von Adatomen hoher Beweglichkeit wachsen (III). In der Phase IV wachsen diese entweder bis zur vollständigen Vervollständigung einer Monolage weiter oder es beginnt die Keimbildung in der zweiten Lage. Der Fall IV (a) tritt ein, wenn die Teilchen auf der Adsorbatschicht genauso oder besser als auf dem Substrat diffundieren und die Diffusion über die Stufenkante energetisch nicht behindert ist. Der Fall IV (b) tritt ein, wenn die Diffusion über die Stufenkante behindert ist. Man spricht in einem solchen Fall von einer Ehrlich-Schwoebel Barriere [3]. Es handelt sich im Fall (b) um eine kinematische Aufrauung, zu der es unabhängig vom Bauer-Kriterium für ein thermodynamisches Gleichgewicht kommen kann.

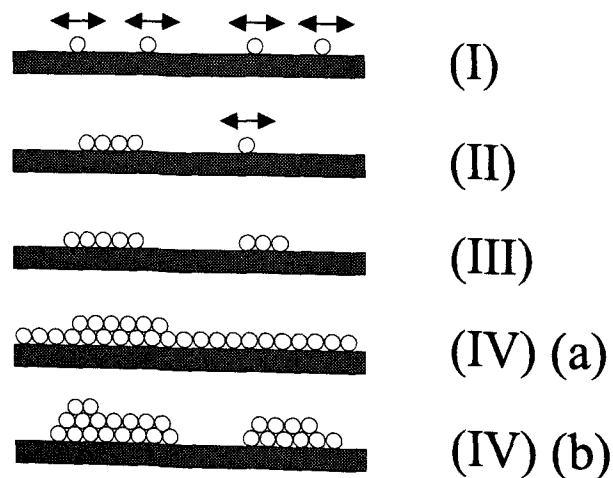


Abbildung 2.3: Kinetisches Modell zum Wachstum dünner Schichten. (I) in der ersten Phase des Wachstums diffundieren einzelne Atome auf der Oberfläche, (II) es bilden sich stabile Keime aus mehreren Adatomen, deren Diffusion behindert ist; die Anzahl der Keime nimmt weiter zu, (III) die Keime wachsen weiter; die Keimdichte nimmt nicht weiter zu, (IV) (a) die Keime wachsen weiter bis zur Vervollständigung einer Monolage oder (b) es bilden sich Keime auf den Adatom-Inseln bevor die erste Lage geschlossen ist. Ursache für letzteres ist das Auftreten einer Ehrlich- Schwoebel Barriere [3].

Die Diffusion, die neben dem Wachstum auch die Migration von Substratatomten in die Adsorbatschicht beschreibt, ist gegeben durch:

$$D = D_o(T) * \exp(-E_a/k_B T) \quad (2.1.2.6)$$

D ist die Diffusionskonstante, D_o ist ein preexponentieller Faktor, E_a ist die Aktivierungsenergie des Diffusionsprozesses, k_B ist die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur. Damit gibt es neben den zwei Parametern D_o und E_a , die das System beschreiben, mit der Temperatur T einen Parameter, der während der Deposition variiert werden kann. Zusätzlich ist allerdings die Temperaturabhängigkeit des preexponentiellen Faktors zu berücksichtigen. Die Aktivierungsenergien E_a für Oberflächen- und Volumendifusionsprozesse unterscheiden sich im allgemeinen deutlich, so daß die Diffusionskonstanten der Oberflächendifusion in der Regel um einige Größenordnungen größer sind als die der Volumendifusion. Neben der Diffusion ist die Aufdampfgeschwindigkeit ein zweites Kriterium, das entscheidend zur Kinetik des Wachstumsprozesses beiträgt [9]. Zusammenfassend kann man sagen, daß auch kinetische Aspekte die Oberflächenbeschaffenheit von dünnen Filmen beeinflussen können. So ist es möglich Systeme herzustellen, die unter dem Aspekt einer minimalen Freien Energie nicht stabil sind. Die experimentellen Parameter zu einer Steuerung eines solchen Wachstums sind die Aufdampfgeschwindigkeit und die Temperatur.

Es zeigt sich also, daß die Struktur und die Oberflächenbeschaffenheit durch die Wahl des Adsorbatsystems, des Substratsystems und der Aufdampftemperatur und -rate gesteuert werden können. Die thermodynamischen Aspekte hiervon werden durch das Bauerkriterium beschrieben. Allerdings geht das Bauerkriterium davon aus, daß das Adsorbat nur in einer Struktur aufwachsen kann. Es hat sich allerdings gezeigt, daß es im Festkörper für manche Elemente in Abhängigkeit von der Temperatur und des Drucks verschiedene, stabile Modifikationen gibt. Solche Modifikationen unterscheiden sich in ihrer Kristallstruktur und in ihrem Magnetismus, wie im übernächsten Abschnitt gezeigt wird. Diese Erscheinung wird Allotropie genannt. Sie hat insbesondere Bedeutung für dünne magnetische Schichten. Wenn man also bestimmen möchte welche Struktur ein Film annimmt, muß man neben dem Beitrag der elastischen Energie (γ_{elas}), den Grenz- und Oberflächenbeiträgen auch die Beiträge der verschiedenen möglichen Kristallstrukturen berücksichtigen. Man muß also den folgenden Term, der die gesamte Freie Energie des Systems F beschreibt, minimieren:

$$F = \gamma_a + \gamma_s + \gamma_g + \gamma_{elas} + \gamma_{krist} \quad (2.1.2.7)$$

Hierbei ist der Term für die Kristallstruktur γ_{krist} als ein Volumenterm zu betrachten. Mit der Änderung der Kristallstruktur kann eine Änderung z.B. des elastischen Verhaltens verbunden sein. Solche Änderungen sind dann jeweils in den anderen Einzeltermen zu berücksichtigen.

2.2 Magnetismus dünner Filme

Das Ziel der einleitenden Abschnitte in diesem Kapitel ist es, eine thermodynamische Beschreibung der verschiedenen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten zu geben. Mit Hilfe dieser Beschreibung soll in Abschnitt 2.4 ein im Vergleich zum Bauer- Kriterium erweitertes Konzept zur Beschreibung der verschiedenen Eigenschaften dünner magnetischer Filme abgeleitet werden. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, ist die Einbeziehung der magnetischen Beiträge aufgrund der engen Verknüpfung zwischen Magnetismus und Struktur notwendig. Dazu wird in diesem Abschnitt eine thermodynamische Beschreibung vorgestellt. Hierbei werden auch insbesondere die charakteristischen Eigenschaften dünner magnetischer Schichten herausgearbeitet.

Um die verschiedenen thermodynamischen Beiträge abzuleiten, die helfen den Magnetismus besser verstehen zu können, ist es sinnvoll von den verschiedenen mikroskopischen Mechanismen auszugehen. Es ist noch anzumerken, daß unter magnetischen Eigenschaften im Folgenden nur die Eigenschaften von Systemen verstanden werden, die kollektiven Magnetismus zeigen. Unter kollektivem Magnetismus ist Ferro- (FM), Ferri- und Antiferromagnetismus (AF) zu verstehen.

Die mikroskopischen Mechanismen sind die Dipol- Dipol- Wechselwirkung und die Austausch- und Spin- Bahn- Kopplung [10, 11]. Die Dipol- Dipol- Wechselwirkung ist aus der Elektrodynamik bekannt. Die Austausch- und die Spin- Bahn- Kopplung ergeben sich allerdings erst aus der Quantentheorie, wobei die Austauschkopplung eine Folge des Pauli- Prinzips ist [11].

Der Magnetismus dünner Filme unterscheidet sich vom Festkörpermagnetismus durch Modifizierungen dieser Wechselwirkungen die durch eine Reduzierung der Dimensionsalität erzeugt wird. So handelt es sich bei einem lagenweise gewachsenen Monolayer um einen idealen 2-dimensionalen Festkörper. Es ist auch möglich, auf speziell präparierten Substraten 1-dimensionale Ketten oder 0-dimensionale Punkte zu erzeugen. Dies ist insbesondere deswegen interessant, um die verschiedenen Modelle zur Beschreibung

des kollektiven Magnetismus zu testen. So ergeben sich aus dem Heisenberg- Modell und dem Ising-Modell [11] z.B. unterschiedliche Vorhersagen, ob Ferromagnetismus in einem isotropen 2-dimensionalen System möglich ist oder nicht. Mermin und Wagner haben gezeigt, daß in einem 2-dimensionalen Heisenberg-System oberhalb von einer Temperatur von $T = 0$ K im Gegensatz zu einem Ising-System kollektiver Magnetismus nicht möglich ist [12].

Ausgehend von der Austausch-, der Spin- Bahn- Kopplung und der Dipol- Dipol- Wechselwirkung lassen sich die magnetischen Beiträge zur Freien Energie bestimmen [10]. Die vier verschiedenen Beiträge, die dabei auftreten sind im folgenden aufgeführt. Von den vier verschiedenen Beiträgen sind die ersten drei bedingt durch ihre Konstruktion reine Volumenterme. Erst im vierten sind die speziellen Einflüsse durch eine Reduktion der Dimensionalität enthalten.

Als erster Beitrag ist der eigentliche Austauschterm γ_{ex} zu nennen. Dieser Term spaltet sich in zwei verschiedene Anteile auf. Der erste Anteil ist für Temperaturen nicht zu nahe an der Curietemperatur nur von der Temperatur abhängig ($\gamma_{ex1}(T)$). Er bezeichnet den Beitrag, der sich aus einer ideal parallelen Anordnung der Spins ergibt. Der zweite Anteil ergibt sich aus einer Modifikation des Austauschfeldes durch die Verkipfung benachbarter Spins gegeneinander [10]. Er ist damit von der speziellen Kristallstruktur abhängig. Für einen einfachen kubischen Kristall ergibt sich damit der folgende Austauschterm:

$$\gamma_{ex} = \gamma_{ex1}(T) + A * (|\nabla m_x|^2 + |\nabla m_y|^2 + |\nabla m_z|^2) \quad (2.2.2.1)$$

A wird Austauschkonstante genannt und beschreibt den summierten Effekt der mikroskopischen Austauschwechselwirkungen. \vec{m} ist der normierte Magnetisierungsvektor, für den $\vec{m}(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r})/M_s$ gilt.

Der zweite und der dritte Term sind magneto- statische Terme und leiten sich damit von einer Dipol- Dipol- Wechselwirkung ab. Der zweite Term (er wird häufig als *der* magneto- statische Term bezeichnet) beschreibt die potentielle Energie der magnetischen Momente in ihrem eigenen Feld \vec{H}_M . Dieser Beitrag ist proportional zu dem Skalarprodukt aus Magnetisierung \vec{M} und dem magneto-statischen Feld \vec{H}_M , das sich aus der Lösung des folgendem Satzes von Gleichungen ergibt:

$$\nabla * \vec{H}_M = -\nabla * \vec{M} \quad (2.2.2.2)$$

$$\nabla \times \vec{H}_M = 0 \quad (2.2.2.3)$$

Der sogenannte Wechselwirkungsterm ist der dritte Term. Er ergibt sich aus der Wechselwirkung der Magnetisierung mit dem äußeren Feld. Der Wechselwirkungsterm ist analog zum magneto-statischen Term proportional zum Skalarprodukt aus äußerem Feld und Magnetisierung.

Der vierte Term ist der sogenannte Anisotropieterm γ_{AN} . Er ist komplexer und für die Beschreibung des Magnetismus dünner Schichten von besonderer Bedeutung. In dem Anisotropieterm sind alle Wechselwirkungskomponenten zusammengefaßt, die die Isotropie des Austauschpotentials brechen, d.h. durch die eine spezielle Richtung unabhängig von der Richtung des äußeren Feldes bevorzugt wird. Die Richtungen mit minimaler Freier Energie werden Leichte Richtungen genannt. Man unterscheidet aufgrund der verschiedenen Ursachen im wesentlichen drei verschiedene Anteile. Diese sind erstens die magnetokristalline, zweitens die magnetoelastische und drittens die Formanisotropie. Die magnetokristalline Anisotropie spiegelt die Kristallstruktur wieder [10]. Die mikroskopische Ursache hierfür ist im wesentlichen die Spin-Bahn-Kopplung, bei der die Kopplungsstärke abhängig von $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ist, wobei \vec{L} das Bahnmoment und \vec{S} das Spinmoment ist. Die Kopplungsstärke ist damit also von dem Winkel zwischen \vec{L} und \vec{S} abhängig. Hierdurch werden im Kristall bestimmte Richtungen ausgezeichnet. Die Ursache für die magneto-elastische Anisotropie ist identisch. Man betrachtet hier aber den Anteil, der sich durch eine elastische Verzerrung der Kristallstruktur ergibt.

Bei der Formanisotropie handelt es sich um einen magneto-statischen Beitrag. Die Dipol-Dipol-Wechselwirkung, die den magneto-statischen Beiträgen zugrunde liegt, ist eine langreichweitige Wechselwirkung. Sie fällt nur proportional zu r^{-3} ab. Daher ist bei der exakten Berechnung der magneto-statischen Beiträge die endliche Ausdehnung der Proben zu berücksichtigen. Die Korrektur, die sich so ergibt, ist die Formanisotropie.

Durch die Einschränkung der Dimensionalität an einer Ober- bzw. Grenzfläche kommt es zu einer zusätzlichen Symmetriebrechung. Diese kann durch die Einführung spezieller Oberflächenanisotropieterme berücksichtigt werden, die für die magneto-kristalline und die magneto-elastische Anisotropie zusätzlich eingeführt werden können. Dieses sind auch die Größen, durch die der Einfluß von Ober- und Grenzflächen auf den Magnetismus dünner Schichten beschrieben werden kann. Zusätzlich muß nur noch betrachtet werden, daß die Austauschwechselwirkung, die eine exponentielle Abhängigkeit von der Entfernung hat, durch einen Übergang von einem dreidimensionalen zu einem zweidimensionalen System ebenfalls beeinflusst wird.

So findet man im wesentlichen drei verschiedene magnetische Größen, die durch den Übergang von einem Festkörper zu einer dünnen Schicht beeinflusst wird: Das ist erstens die Richtung der Magnetisierung (Anisotropien), das magnetische Moment einer Einheitszelle (Austauschterm) und die Curietemperatur (Austauschterm).

2.3 Wechselbeziehung zwischen Struktur und Magnetismus

Wie schon im Abschnitt 2.1 bemerkt wurde, findet man für verschiedene Elemente in Abhängigkeit von der Temperatur und des Drucks unterschiedliche Kristallstrukturen. Die magnetischen Übergangsmetalle (Cr, Mn, Ni, Co, Fe) bilden aufgrund ihrer magnetischen Eigenschaften besonders häufig allotrope Strukturen aus [4]. Hierbei werden neben den strukturellen auch die magnetischen Eigenschaften der verschiedenen Modifikationen verändert. Dies kann sowohl das magnetische Moment pro Einheitszelle als auch die magnetische Ordnung (ferro- oder antiferromagnetisch) betreffen. Insbesondere bei Fe und Mn ist die Allotropie besonders ausgeprägt. Für Fe ist in Abb. 2.4 das Ergebnis einer theoretischen Untersuchung gezeigt [13]. Insbesondere wurde die totale Freie Energie verschiedener Strukturen in Abhängigkeit des atomaren Volumens untersucht. Man erkennt an der Abbildung, daß die verschiedenen Modifikationen für unterschiedliche Volumina ihr jeweiliges Minimum erreichen. Dabei muß beachtet werden, daß von idealen d.h. unverzerrten Strukturen ausgegangen wurde. Außerdem zeigt sich, daß für unterschiedliche Volumina unterschiedliche Modifikationen optimal sind. Hierin zeigt sich die Allotropie von Fe. Für Mn und Fe sind in Tab. 2.1 die Ergebnisse von Berechnungen von Asada und Terakura [14, 15] aufgetragen, die mittels Spindichtenäherung und generalisierter Gradientennäherung durchgeführt wurden. Es ist hierbei nicht nur die Energie der Minima der einzelnen Phasen angegeben, sondern auch zusätzlich das magnetische Moment, das mit diesen Minima verknüpft ist. Im Allgemeinen ist zu berücksichtigen, daß eine Veränderung des magnetischen Momentes mit einer Änderung des Volumens verknüpft ist. Die Ursache hierfür bildet das Pauli-Prinzip [16].

Diese Ergebnisse zeigen, daß es durch die strukturellen Veränderungen beim heteroepitaktischen Wachstum möglich sein sollte, allotrope Modifikationen der magnetischen Übergangsmetalle als dünne Schichten in verschiedenen Schichtdickenbereichen mit un-

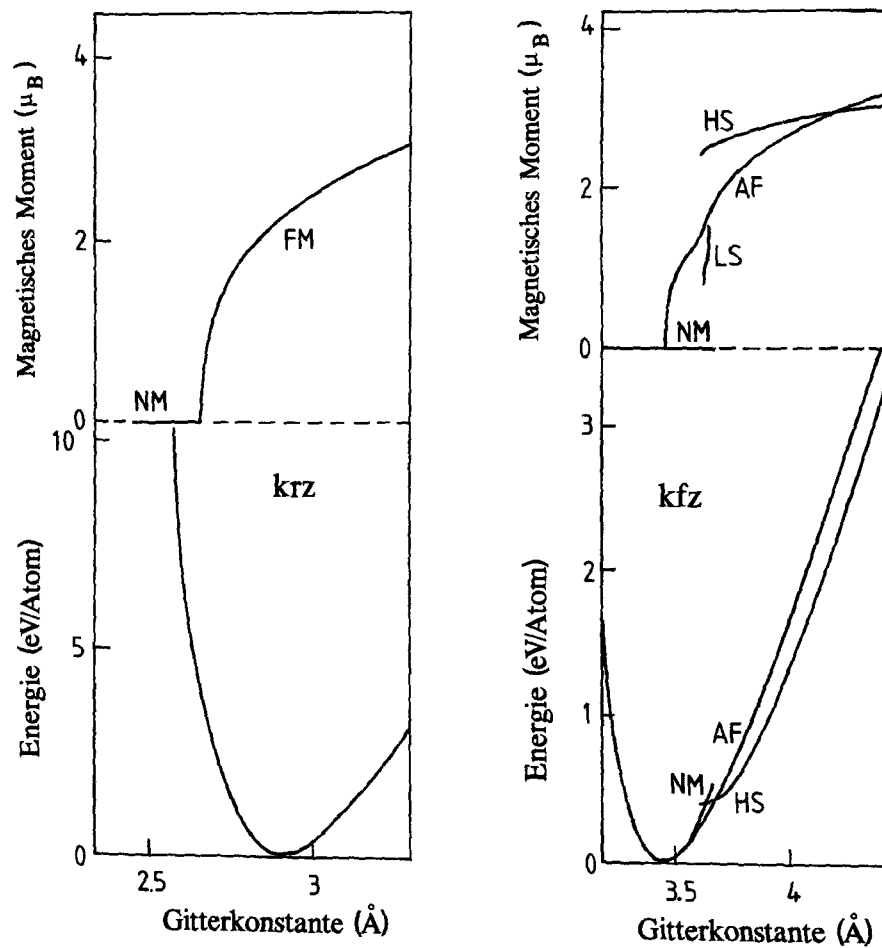


Abbildung 2.4: Fe- Phasen in Abhängigkeit des atomaren Volumens (Gitterkonstante). Beim Fe findet man insbesondere für die kfz- Strukturen eine Vielzahl möglicher Strukturen in Abhängigkeit des atomaren Volumens bzw. der Gitterkonstanten. Auch die magnetischen Momente dieser verschiedenen Phasen sind sehr stark vom Volumen abhängig [13]. (NM= kein kollektiver Magnetismus, HS (LS) ferromagnetische Phase mit großem (kleinem) Moment).

terschiedlichen magnetischen Eigenschaften zu stabilisieren. Magnetische dünne Filme sind allerdings nicht nur als Einzelfilme von Interesse. Es sind insbesondere auch Systeme, die aus verschiedenen magnetischen Schichten bestehen, durch ihre besonderen magnetischen Eigenschaften von Bedeutung. Zu diesen kommt es, da bei Mehrschichtsystemen die magnetischen Eigenschaften der dünnen Filme nicht nur durch die Struktur der Einzelschichten beeinflusst wird, sondern auch über die Grenzflächen durch die

Tabelle 2.1: Ergebnisse der Berechnung der totalen Energie für verschiedene Phasen von magnetischen Übergangsmetallen nach Ref.[14, 15].

Element	Struktur	Magnetismus	E_{tot} [Ry]	a [Å]	m [μ_B]
Mn	krz	AF	-2318,3381	3,01	2,73
		FM	-2318,3416	2,87	0,99
	kfz	AF	-2318,3429	3,68	2,13
Fe	kfz	NM	-2546,6560	3,51	-
		AF	-2546,6579	3,55	1,21
		FM	-2546,6551	3,67	2,56
	krz	FM	-2546,6703	2,89	2,32

magnetischen Eigenschaften der benachbarten Schichten. Die Grundlagen dafür sind, wie in Anhang A geschildert, die verschiedenen magnetischen Kopplungen.

2.4 Erweitertes Beschreibungsmodell

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wurde gezeigt, wie das Wachstum und die strukturellen Aspekte dünner Schichten beschrieben werden können. Dabei wurde insbesondere die Methodik der Thermodynamik verwendet, um kinematische und Gleichgewichtseigenschaften zu beschreiben. Im zweiten Abschnitt wurde die Beschreibung dünner magnetischer Schichten durch die verschiedenen Beiträge zur Freien Energie vorgestellt. Durch eine Minimierung der Freien Energie läßt sich der Gleichgewichtszustand und so auch seine magnetischen Eigenschaften bestimmen.

Im letzten Abschnitt wurde dann gezeigt, daß es bei den magnetischen Übergangsmetallen eine starke Wechselbeziehung zwischen strukturellen und magnetischen Eigenschaften gibt und daß die Allotropie eine Folge dieser Wechselbeziehung ist. Weiterhin wurde daraufhingewiesen, daß es durch mögliche magnetische Kopplungen zwischen zwei verschiedenen dünnen Filmen zu einer Beeinflussung der Wechselwirkung zwischen Struktur und Magnetismus kommen kann. Diese Beeinflussung stellt eine Erweiterung der im ersten Abschnitt gezeigten Beeinflussung der Struktur dünner Schichten dar.

Diese Einführung zeigt, daß das Wachstum magnetischer dünner Schichten weitaus komplexer ist als das Wachstum nicht- magnetischer dünner Schichten. Daher ist das Modell zu erweitern, das zur Beschreibung des Wachstums dünner Filme im ersten Abschnitt dargestellt wurde. Für dieses erweiterte Modell zur Beschreibung der zu erwartenden Struktur wird wiederum auf das thermodynamische Konzept der Minimierung der gesamten Freien Energie des Systems zurückgegriffen. Dabei wird von verschiedenen allotropen Modifikationen ausgegangen. Die unterschiedlichen Modifikationen werden dann entsprechend ihrer magnetischen und strukturellen Eigenschaften durch die verschiedenen Terme beschrieben. Dieses Modell bildet weiterhin nur die Eigenschaften einer magnetischen Einzelschicht ab. Daher werden auch Einflüsse durch magnetische Kopplungen nicht berücksichtigt. Das Modell beruht dabei im wesentlichen auf den Überlegungen von M. Wuttig und B. Feldmann [17]:

$$\gamma_{Ges} = \gamma_a + \gamma_s + \gamma_g + \gamma_{elas} + \gamma_{krist} + \gamma_{ex} + \gamma_{AN} + \gamma_{magst} \quad (2.4.2.1)$$

γ_{magst} ist die Summe der beiden magneto-statischen Energiebeiträge, die die Dipol-Dipol-Wechselwirkung der Magnetisierung mit dem äußerem Feld und mit dem eigenen Feld beschreiben. Für eine weitere Betrachtung der gesamten Freien Energie ist es allerdings angebracht den Ausdruck zu vereinfachen, indem man z.B. γ_a und γ_s zu einem Oberflächenbeitrag γ_o zusammenfaßt. Im zweiten Abschnitt wurde gezeigt, daß γ_{ex} und γ_{magst} zwar unterschiedliche mikroskopische Ursachen zugrunde liegen, aber diese beiden Terme im wesentlichen Festkörpereigenschaften sind und die Oberflächeneigenschaften im γ_{AN} Term enthalten sind. Daher kann man beide Terme sehr gut zusammenfassen γ_{mag} . Weiterhin ergibt sich bei einer Betrachtung der typischen Größenordnungen, wie sie in Tab.2.2 dargestellt sind, daß der Anisotropiebeitrag im allgemeinen wesentlich kleiner ist als die anderen Beiträge. Er ist daher bei der Bestimmung der strukturellen und magnetischen Modifikation zu vernachlässigen. Allerdings ist er für die Bestimmung der Magnetisierungsrichtung von entscheidender Bedeutung. Damit ergibt sich für die Freie Energie die folgende Gleichung:

$$\tilde{\gamma}_{Ges} = \gamma_o + \gamma_g + \gamma_{elas} + \gamma_{krist} + \gamma_{mag} \quad (2.4.2.2)$$

Zur Bestimmung der Grundzustandsstruktur sind die Differenzen zwischen den verschiedenen Modifikationen entscheidend. Sie sind in Tab. 2.2 dargestellt. Wie aus Tab. 2.2 ersichtlich können insbesondere γ_{krist} und γ_{mag} die entscheidenden Energiebeiträge sein. Andererseits können die Differenzbeiträge für die Kristallstruktur und

Tabelle 2.2: Die Differenzen für die verschiedenen Beiträge zur Freien Energie bei verschiedenen allotropen Modifikationen.

Art des Energiebeitrags	Energiedifferenz
Kristallstruktur	0,01 bis 1 eV/Atom
Oberfläche	$\approx 0,2$ eV/Atom
Grenzfläche	$\approx 0,2$ eV/Atom
Verzerrung	bis $\approx 0,2$ eV/Atom
magnetischer Zustand	0,01 bis 1 eV/Atom
Anisotropie	10^{-4} bis 10^{-6} eV/Atom

den magnetischen Zustand zwischen den verschiedenen Modifikationen auch sehr gering sein, so daß die anderen Beiträge entscheiden können. Dieses Modell stellt konzeptionell eine wesentliche Erweiterung der Vorstellungen dar, die der in Abb. 2.2 gezeigten Unterscheidung zwischen Homo- und Heteroepitaxie zugrunde liegen.

Damit ergibt sich auch die Frage, inwieweit in einem solchen Fall die thermodynamischen Vorstellungen und Konzepte, die hier verwendet wurden, anwendbar sind. Wo liegen die Grenzen eines solchen Modells und eignet es sich möglicherweise auch zur Beschreibung komplexer Systeme, wie sie Mehrfachschichtsysteme mit ihren strukturellen und magnetischen Wechselwirkungen darstellen?

Zum Test dieses Modells eignen sich daher insbesondere Systeme, für die die Grenzen des Wachstums verschiedener metastabiler Phasen getestet werden können. So ist es möglich die Relevanz der verschiedenen Energieterme zu überprüfen. Dafür kommen insbesondere Systeme in Frage, die kubisch- raumzentrierte (krz)- und kubisch-flächenzentrierte (kfz)- Strukturen bilden. Der Grund, daß solche Systeme existieren, ist, daß sich krz- Strukturen durch eine tetragonale Verzerrung in kfz- Strukturen umwandeln lassen. Weiterhin eignen sich Systeme bei denen gezielt der Einfluß von strukturellen und magnetischen Wechselwirkungen studiert werden kann. Beide Gesichtspunkte werden in den Kapiteln 4 bis 6 untersucht. Bei der Untersuchung komplexer Systeme ist es dabei von Vorteil auf bekannte Systeme zurückgreifen zu können. Für die in den Kapiteln 4 und 6 durchgeführten Untersuchungen dient Fe auf Cu(001) als ein Referenzsystem. Dies wird daher in dem folgendem Abschnitt vorgestellt.

2.5 Referenzsystem Fe/Cu(001)

Bei dem System Fe auf Cu(001) handelt es sich um ein sehr gut charakterisiertes System. Es wurde in den letzten Jahren von einer Vielzahl von Gruppen mit einer Fülle von verschiedenen Methoden hinsichtlich seines Wachstums [18], seiner magnetischen [19, 20], elektronischen [21] und strukturellen [22–29] Eigenschaften untersucht.

Dabei ergibt sich ein sehr komplexes Bild der unterschiedlichen Eigenschaften. In Abb. 2.5 ist ein Überblick über die wichtigsten und markantesten Ergebnisse gegeben. Man findet zwischen den verschiedenen Eigenschaften eine ausgeprägte Korrelation. Diese Korrelation wird besonders im Fe- Schichtdickenbereich bis zu 10 Monolagen (ML) zwischen den strukturellen und magnetischen Eigenschaften deutlich. Insgesamt findet man, wie in der Abbildung dargestellt, bei der Präparation von Fe auf Cu(001) bei 300 K drei verschiedene Schichtdickenbereiche.

Im ersten Bereich bis ca. 3,5 ML findet man eine ferromagnetische, kfz Phase. Der Film ist dabei homogen magnetisiert mit einem magnetischen Moment von ca. $2,6 \mu_B$ [14]. Mit niederenergetischer Elektronenstreuung (LEED) findet man für diesen Bereich bis zu einer Schichtdicke von ca. 2 ML eine (1x1) und oberhalb dieser Schichtdicke bis zu ca. 3,5 ML eine (4x1)- Überstruktur. Der Bereich der (4x1)-Struktur ist durch eine Korrugation des gesamten Fe-Films geprägt [23]. Man findet für ihn durch LEED I(V)-Rechnungen eine tetragonal verzerrte kfz-Phase mit einem Volumen von ca. $12,1 \text{ \AA}^3$ [23].

In dem Schichtdickenbereich von 3,5 bis 4,5 ML Fe-Filmdicke findet ein Übergang in die zweite kfz-Phase statt. Dieser Bereich ist durch einen starken Abfall der Magnetisierung, einem gleichzeitigen starken Anstieg der Koerzitivfeldstärke und einer (5x1)-Struktur geprägt [23, 28]. Die magnetischen Eigenschaften in diesem Bereich lassen sich durch ein Modell der Phasenkoexistenz und einem Anheften („Pinnen“) der Domänenwälle an die energetisch günstigere Phase erklären [30]. Die Abhängigkeit dieses Strukturübergangs von der Temperatur ist von Zharnikov et al. [22] untersucht worden. Bei der zweiten Phase handelt es sich um eine aus zwei verschiedenen Schichten bestehende kfz-Phase. Sie tritt auf ab einer Schichtdicke von 4,5 ML. Dieser Bereich ist durch eine annähernd konstant bleibende Magnetisierung geprägt. LEED I(V)- und magnetische Untersuchungen haben gezeigt, daß die obersten zwei Atomlagen ferromagnetisch und tetragonal verzerrt sind. Die oberste Atomlage hat das gleiche atomare Volumen und trägt damit ungefähr das gleiche Moment wie die kfz-Fe-Phase im ersten

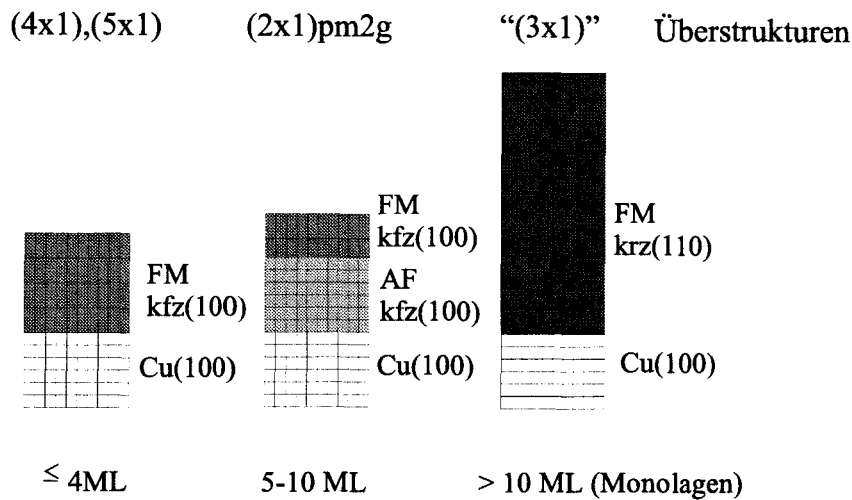
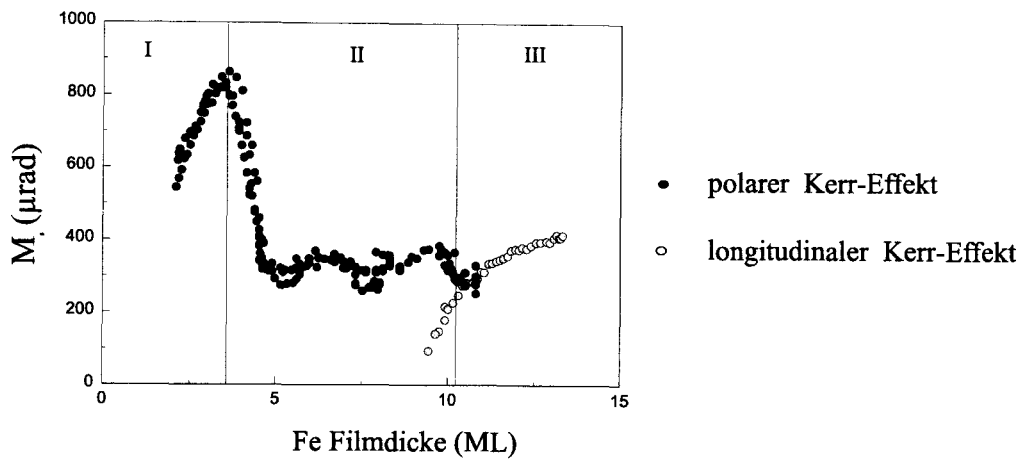


Abbildung 2.5: Bei 300 K Präparation findet man in Abhängigkeit von der Fe- Schichtdicke drei verschiedene Phasen mit charakteristischem magnetischem Verhalten und LEED- Überstrukturen [16, 19].

Schichtdickenbereich ($2,6 \mu_B$) [31, 32]. Bei der zweiten Lage ist die tetragonale Verzer- rung im wesentlichen abgebaut. Damit ist das Volumen und damit auch das Moment kleiner als für die oberste Atomlage. Die darunter liegenden Lagen sind fast exakt kubisch mit einem Volumen von ca. $11,6 \text{ \AA}^3$. Die magnetischen Eigenschaften dieser Lagen waren lange Zeit umstritten. Sie tragen nicht zur Magnetisierung der Fe-Schicht in diesem Schichtdickenbereich bei. Mit den unterschiedlichen Methoden wurden die Atomlagen als entweder para- oder antiferromagnetisch charakterisiert, wobei die

Anzeichen, daß es sich um eine antiferromagnetische Phase handelt, deutlich signifikanter sind [20, 33, 34]. Dieser Schichtdickenbereich ist im LEED durch eine $(2 \times 1) \text{pm}^2 \text{g}$ Struktur charakterisiert, die durch eine sinusförmige Verschiebung der Atome in der $[011]$ -Richtung erzeugt wird [35]. Rastertunnelmikroskopie (RTM)- [18] und mittlere-energetische Elektronenstreuversuche (MEED)-Untersuchungen [36, 37] haben gezeigt, daß die beiden kfz-Phasen durch ein fast lagenweises Wachstum mit einer geringen Oberflächenrauigkeit geprägt sind. Für beide Phasen steht die Magnetisierung senkrecht zur Oberflächenebene.

Ab einer Schichtdicke von 10 ML findet ein Phasenübergang in eine krz(110)-Phase statt. Verbunden ist damit ein Spinreorientierungsübergang. Für die krz-Phase liegt die Magnetisierung in der Oberflächenebene mit den leichten Richtungen entlang den $[011]$ -Richtungen. Die Phase entspricht in ihrem Volumen, ihrer Magnetisierung und ihren sonstigen Eigenschaften der bei 300 K stabilen Festkörpermodifikation von Fe. Das magnetische Verhalten im Übergangsbereich mit einem zweiten Maximum in der Koerzitivfeldstärke läßt sich analog zum ersten Übergangsbereich erklären [30]. Weiterhin haben Untersuchungen gezeigt, daß die zweite kfz-Phase thermodynamisch instabil gegenüber einer Umwandlung in die krz-Phase ist. Es handelt sich bei einer solchen Umwandlung um eine sogenannte martensitische Umwandlung [26, 29].

Aufgrund der verschiedenen allotropen Strukturen mit ihrer engen Verknüpfung von strukturellen und magnetischen Eigenschaften ist Fe/Cu(001) besonders gut als eine Basis für den Test des thermodynamischen Beschreibungsmodells geeignet.

Kapitel 3

Experimentelle Methoden

3.1 Die Apparatur

Die Experimente, die in den Kapiteln 4 bis 6 gezeigt werden, wurden im Ultrahochvakuum durchgeführt. Die Vakuumkammer ist mit verschiedenen Analysemethoden und den notwendigen Präparationsmöglichkeiten ausgerüstet. Darüberhinaus ist sie mit einer μ -Metallabschirmung versehen, um Störungen durch externe Magnetfelder wie z.B. dem Erdmagnetfeld zu verhindern.

Das Vakuum wurde durch einen Turbomolekular- und Drehschieber-Pumpstand und eine kombinierte Titansublimations- und Ionengetterpumpe erzeugt und aufrechterhalten. Der Basisdruck der Kammer betrug nach einem 36- stündigem Ausheizen bei 420 bis 580 K ca. $6 \cdot 10^{-9}$ Pa. Zur qualitativen und quantitativen Restgasanalyse befinden sich am System ein Quadropolmassenspektrometer und eine Ionisationsdruckmeßröhre, die es ermöglicht den Gesamtgasdruck in einem Bereich zwischen $1 \cdot 10^{-1}$ und $3 \cdot 10^{-9}$ Pa zu messen. Das Massenspektrometer ermöglicht es das Restgas massenaufgelöst zu analysieren.

Die Apparatur enthält in drei verschiedenen Ebenen die Geräte zur Analyse und Präparation. In dieser Arbeit wurden nur die Geräte der beiden oberen Ebenen verwendet. Einen Querschnitt durch die oberste Apparaturebene zeigt Abb.3.1. Diese Ebene enthält alle Geräte die zur Präparation und zur strukturellen Charakterisierung verwendet wurden, d.h. eine Ionenkanone zum Reinigen des Kristalls mittels Ionenätzen, die Aufdampföfen zur Deposition der Metallfilme, das LEED- System und

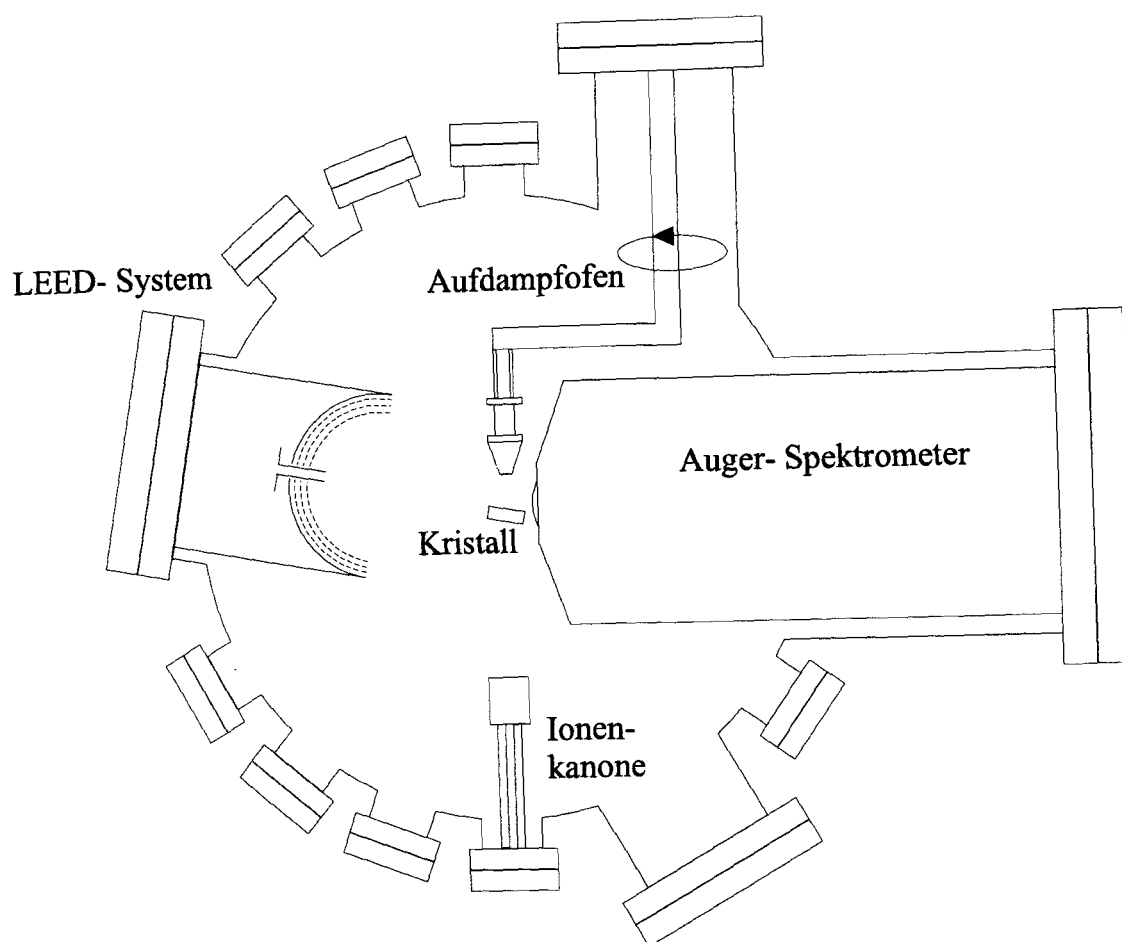


Abbildung 3.1: In der oberen Apparaturebene befinden sich ein LEED, ein Auger-spektrometer, die Ionenkanone mit integriertem Gaseinlaß und die Aufdampföfen. Die Skizze zeigt die Aufdampfposition.

das Augerspektrometer mit Zylinderspiegellanlysator.

Die Streuexperimente mit mittlereenergetischen Elektronen (MEED), die zur Charakterisierung des Wachstums verwendet wurden, wurden mit Hilfe der Elektronenkanone des Augersystems und dem Fluoreszenzschirm des LEED-Systems durchgeführt. Dazu wurde die in Abb. 3.1 gezeigte Anordnung des Kristalls, des Aufdampfofens, des Auger und des LEED- Systems verwendet. Die Energie der Elektronen während der MEED-Untersuchungen betrug 3 keV und der Winkel zwischen Oberflächennormale und Elektronenstrahl 81° . Bei dieser Einstellung wird die Probe in der Einfallsrichtung auf einer Länge von 3 mm bestrahlt und der gesamte bestrahlte Bereich auf der

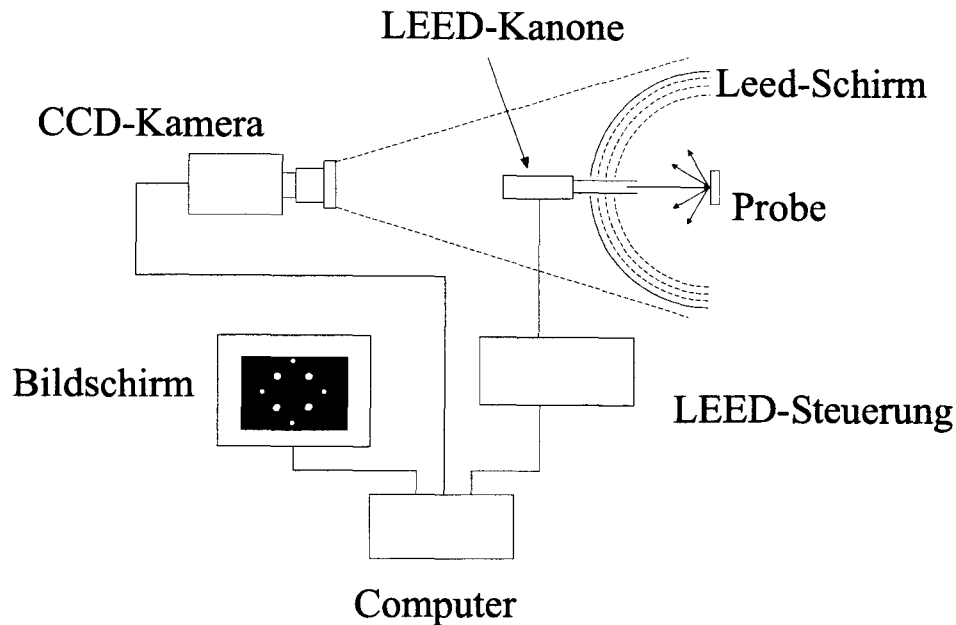


Abbildung 3.2: Die Aufnahme der LEED I(V)-Kurven wird mit Hilfe spezieller Software gesteuert. Die Bildinformation (Intensitätsinformation) der CCD-Kamera wird über eine Frame-Grabber-Karte eingelesen und digitalisiert. Die LEED-Steuerung wird über einen DA-Wandlerausgang angesprochen.

Probe beträgt ca. 1 mm^2 . Die Messung des Divergenzwinkels des Elektronenstrahls der Auger-Elektronenkanone ergab einen Winkel $\Delta\Theta = 0.8^\circ \pm 0.2^\circ$. Damit beträgt die Transferweite in Strahlrichtung ca. 90 \AA [19].

Wie Abb. 3.2 schematisch zeigt, können mit Hilfe des Bildaufnahmesystems über eine CCD-Kamera die Intensitäten der Beugungsreflexe auf dem Fluoreszenzschirm quantitativ erfaßt werden. Das Bildaufnahmesystem besteht aus einer CCD-Kamera, einer Frame-Grabber-Karte, die das analoge Signal der Kamera in ein digitales umwandelt, einem PC und einer AD/DA-Wandler-Karte, die bei den LEED I(V)-Messungen zur Steuerung des LEED-Netztes verwendet wird. Auf die LEED Messungen und deren Auswertung wird in Abschnitt 3.4 näher eingegangen.

Die zweite Ebene dient zur Messung des magneto-optischen Kerr-Effekts.

Die Probe läßt sich mit Hilfe eines xyz-Manipulators zu allen erforderlichen Positionen bewegen. Dieser Manipulator ist neben den drei Freiheitsgraden der Translation auch mit zwei Freiheitsgraden der Rotation ausgestattet.

3.2 Präparation

Als Substrat wurden Cu- und Cu₃Au- Einkristalle verwendet. Die Kristalle wurden von U. Linke im Metallographielabor des Instituts geschnitten, orientiert und poliert. Sie waren bis auf 0,2° genau in [001]-Richtung ausgerichtet. Die Präparation des Einkristalls erfolgte durch Zyklen von Ionenätzen und Heizen, wobei das Ionenätzen der Reinigung der Kristalloberfläche durch Materialabtrag und das Heizen dem Ausheilen der Oberfläche d.h. dem Glätten durch erhöhte Oberflächendiffusion diente. Dieser Vorgang wurde solange wiederholt, bis die Kontamination der Oberfläche unter der Nachweisgrenze für Kohlen-, Sauerstoff und Schwefel lag (siehe dazu auch die Ref.[16, 19]). Die Energie der zum Ionenätzen verwendeten Ar⁺-Ionen betrug 2 keV und die maximale Heiztemperatur zwischen 920 und 940 K für den Cu(001)-Kristall. Zur genauen Beschreibung der Präparation des Cu₃Au- Einkristalls siehe [16].

Für die verschiedenen Materialien (Mn, Ni, Fe) wurden unterschiedliche Verdampfer benutzt. Das Mangan wurde mit Hilfe einer Knudsenzelle verdampft. Für das Fe und das Ni wurde ein schwenkbarer Doppelofen verwendet, wie er in Abb. 3.1 skizziert ist. Bei diesem Ofen wird das Verdampfungsgut durch eine Strahlungsheizung erwärmt. Als Verdampfungsgut wurden nur hochreine Materialien (Mn 99,99 %, Fe 99,99 % und Ni 99,98 %) verwendet. Die Öfen wurden vor dem Aufdampfen der Schichten solange im Leerlauf betrieben, bis der Gasdruck in der Kammer während des Betriebs nicht über $2 \cdot 10^{-8}$ Pa stieg (für Fe und Ni). Bei Mn lag der Gasdruck während des Betriebs typischerweise zwischen $1,5$ und $3,5 \cdot 10^{-8}$ Pa [16].

Zur Bestimmung der Schichtdicken der aufgedampften Filmen wurden Auger- und MEED- Studien verwendet. Wie in Ref. [19] geschildert, ist man durch die Bestimmung der Höhen der einzelnen Augerpeaks prinzipiell in der Lage die Dicke von Metallfilmen mit Schichtdicken von 1 bis ca. 10 ML zu bestimmen. Da dieses Verfahren alleine allerdings mit einem Fehler von bis ± 1 ML behaftet ist, wurden daher zur Ergänzung der Auger- Messungen MEED- Kurven verwendet. Durch Oszillationen in den MEED- Intensitäten ist es möglich, die Dicke der Schichten unabhängig zu bestimmen und die Augerverhältnisse zu eichen. Für die Eichungen der Schichtdicken bei den Systemen Mn/Cu₃Au(100) und Fe/Cu₃Au(100) wird auf die Ref. [16] verwiesen. Für das System Fe/Ni(100) ergaben die Vergleiche mit den MEED- Untersuchungen das in Abb. 3.3 dargestellte Eichdiagramm. Wobei dieses Diagramm nur zwischen 1 und 10 ML verwendet werden sollte, da sonst der Fehler der Schichtdickenbestimmung zu groß wird.

Diese Eichung war für die Fe-Schicht notwendig, da die Fe-Schichten zur Herabsetzung

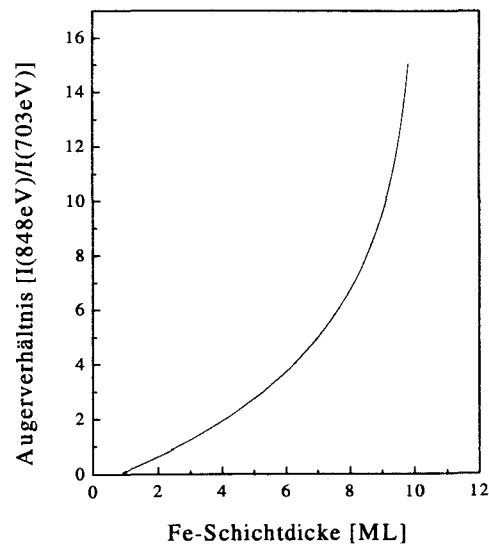


Abbildung 3.3: Die Eichung der Augerverhältnisse, wie sie für das System Fe auf Ni/Cu(001) zur Bestimmung der Fe-Schichtdicke verwendet wurde. Es ist dabei das Verhältnis der aus einer differentiellen Darstellung gewonnen Höhe der Augerpeaks gegen die Fe-Schichtdicke dargestellt. Die Kurve zeigt das bekannte exponentielle Verhalten [16].

des experimentellen Aufwandes auch mit einem keilförmigen Querschnitt aufgewachsen wurden. Dadurch war eine Schichtdickenbestimmung mit Hilfe des MEED nicht mehr möglich. Dies war für die Ni-Schicht bei dem System Fe/Ni/Cu(100) nicht notwendig, da hier die Schichtdicke nicht variiert wurde.

3.3 MOKE

Zur Untersuchung der magnetischen Eigenschaften der dünnen Schichten wird die magneto-optische Kerr-Ellipsometrie verwendet. Die verschiedenen auf dem magneto-optischen Kerr-Effekt (MOKE) beruhenden Verfahren gehören zu den wichtigsten und am weitesten verbreiteten Verfahren zur magnetischen Charakterisierung von dünnen Schichten und Schichtsystemen. Mit diesen Verfahren ist es möglich die Magnetisierung und die Orientierung der Magnetisierung abzubilden.

Als magneto-optischen Kerr-Effekt bezeichnet man die Drehung der Polarisationssebene, die linear polarisiertes Licht bei der Reflexion an einer ferro(para)magnetischen Ober- oder Grenzfläche erfährt (siehe dazu Abb. 3.4). Außerdem gibt es verwandte

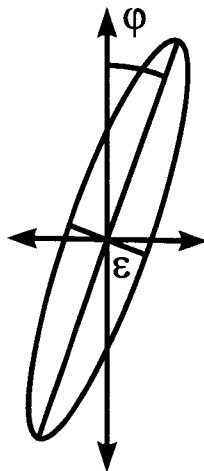


Abbildung 3.4: Der Einfluß des magneto-optischen Kerr-Effekts auf den Polarisationszustand des reflektierten Lichts, den man allgemein als eine Ellipse darstellen kann [38]. Die große Achse ist um einen Winkel φ gegen die ursprüngliche Richtung gedreht. Man nennt diese Drehung Kerr-Drehung. Das Verhältnis zwischen den Achsen der Ellipse wird als Elliptizität (ε) bezeichnet [16].

magneto-optische Effekte [38] wie den Faraday- und den Voigt- Effekt. Auf diese Eigenschaften wird in dieser Arbeit allerdings nicht eingegangen.

Zur Beschreibung der magneto-optischen Effekte gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten [39]: Erstens eine mikroskopische quantentheoretische Beschreibung [40] und zweitens den Ansatz einer klassischen Dispersionstheorie [38, 39]. Der

mikroskopisch- quantentheoretische Ansatz zeigt, daß für den Kerr-Effekt ein Zusammenwirken von Austauschaufspaltung und Spin-Orbit-Kopplung notwendig ist. Darüberhinaus gibt es aber weitere Effekte, die die Größe des MOKE beeinflussen können [38, 40, 41].

Beim MOKE handelt es sich um einen Effekt, bei dem der Polarisationszustand des li-

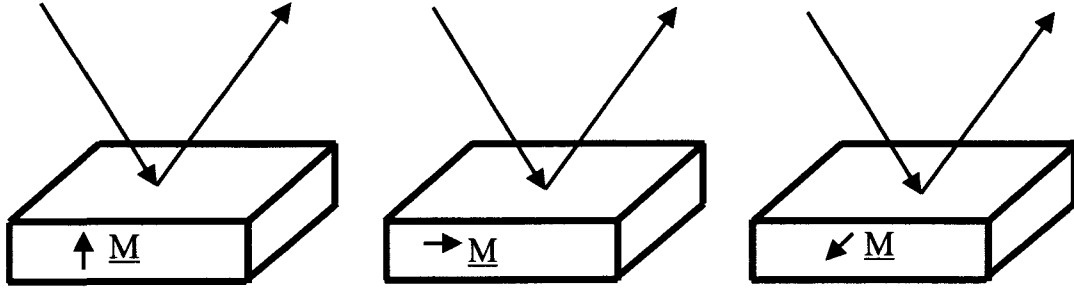


Abbildung 3.5: Die verschiedenen Geometrien zur Messung des magneto-optischen Kerr-Effekts. Sie unterscheiden sich durch eine unterschiedliche Orientierung der Magnetisierung und der Einfallsebene des Lichts. Man unterscheidet so den polaren, den longitudinalen und den transversalen Kerr-Effekt (von links nach rechts).

near polarisierten Lichtes geändert wird. Man kann linear polarisiertes Licht allgemein als eine Superposition von rechts- und linkszirkular polarisiertem Licht darstellen. Da der Kerr- Effekt die lineare Polarisation des Lichts ändert, ist zu erwarten, daß diese beiden Komponenten unterschiedlich reflektiert werden. Dies kann am besten beschrieben werden, wenn man das linear- polarisierte Licht durch die verschiedenen Anteile darstellt. Dazu ist die folgende Koordinatentransformation notwendig (hier für die Komponenten des elektrischen Feldes gezeigt):

$$E_{\pm} = E_x \pm E_y \quad (3.3.3.1)$$

Entscheidend für die unterschiedliche Reflexion der beiden zirkularen Anteile ist die Wechselwirkung mit der Oberfläche. Die Eigenschaften der Oberfläche können durch einen dielektrischen Tensor dargestellt werden. Der dielektrische Tensor eines magneto-optisch aktiven Mediums hat die folgende allgemeine Form:

$$\vec{\epsilon} = \epsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & iQ_z & -iQ_y \\ -iQ_z & 1 & iQ_x \\ iQ_y & -iQ_x & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3.3.2)$$

Dabei sind die Komponenten des komplexen magneto-optischen Kopplungs- oder

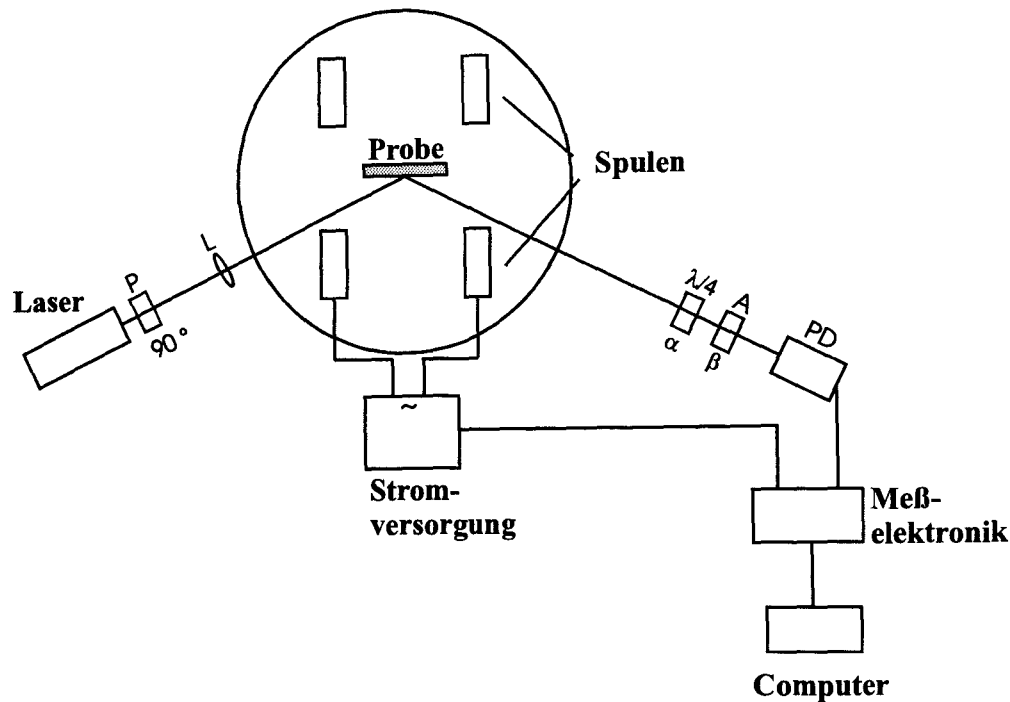


Abbildung 3.6: Der Versuchsaufbau, wie er für die in dieser Arbeit gezeigten MOKE-Messungen verwendet wurde (Nullellipsometrie). Es handelt sich hierbei um den Aufbau zur Messung des longitudinalen Kerr-Effekts. Der Weg des Laserstrahls verläuft von links nach rechts. Durch den ersten Polarisator (P) wird die Polarisationssebene festgelegt. 90° bedeutet, die Polarisationssebene liegt in der Bildebene. Durch die Linse (L) wird der Strahl auf die Probe gebündelt. Beim Ein- und Austritt aus dem UHV-System passiert der Strahl jeweils ein Fenster. Durch das $\lambda/4$ -Plättchen werden die dabei auftretenden Effekte kompensiert. Mit A ist der als Analysator bezeichnete zweite Polarisationsfilter bezeichnet. α und β bezeichnet die Verkippung gegen die von P vorgegebene Ebene. Die Photodiode (PD) dient zur Messung der Lichtintensität. Die nachgeschaltete Meßelektronik ist für die Meßwerterfassung und die Steuerung des Experiments durch den Computer zuständig.

Voigt-Vektors $\vec{Q} = \begin{pmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{pmatrix}$ von der Magnetisierung, der Wellenlänge des einfallenden Lichts und dem Material abhängig [39, 42]. Die verschiedenen Komponenten des Voigt-Vektors sind voneinander unabhängig. Aus dem dielektrischen Tensor lassen sich nun

alle anderen optischen Größen, wie z.B. der Brechungsindex, herleiten [38, 39]. Dieser kann in einen rechts- und einen links-zirkular-polarisierten Anteil zerlegt werden $n_{\pm} = n_o(1 \pm \frac{1}{2}\vec{Q}\vec{k})$, wobei n_o der Brechungsindex des nicht magnetisierten Materials und \vec{k} der Einheitsvektor in der Richtung der Lichtpropagation ist. Damit ergeben sich für die beiden Größen, die den Kerr-Effekt beschreiben, als Real- (Rotation) und als Imaginärteil (Elliptizität) von:

$$\Delta n = n_- - n_+ = n_o\vec{Q}\vec{k} \quad (3.3.3.3)$$

Beide sind proportional zur Magnetisierung.

Je nach Orientierung der Magnetisierung zur Oberflächennormale und zur Einfallsebene des Lichtes unterscheidet man die in Abb. 3.5 dargestellten Geometrien. Sie spiegeln die drei Komponenten des Voigt- Vektors wieder. Beim polaren Kerr- Effekt fällt das Licht senkrecht auf die Probe. Das Magnetfeld wird parallel zur Einfallsrichtung des Lichtes angelegt und steht damit ebenfalls senkrecht zur Oberfläche. Als zweite Variante gibt es den longitudinalen Kerr-Effekt. Hierbei fällt das Licht idealerweise in einem streifenden Einfall auf die Probe. Das Magnetfeld wird in der Ebene parallel zur Einfallsrichtung des Laserstrahls angelegt. Dabei kann die Polarisationsrichtung des Lichts einerseits senkrecht auf der Probenoberfläche stehen, d.h. in Richtung der Oberflächennormalen oder andererseits in der Oberflächenebene liegen. Alle in dieser Arbeit gezeigten longitudinalen Kerr-Messungen entsprachen der ersten Variante. Der in Abb. 3.5 als drittes gezeigte transversale Kerr- Effekt unterscheidet sich vom longitudinalen Kerr-Effekt dadurch, daß die Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Einfallsrichtung des Lichtes steht. Diese Geometrie wird sehr selten verwendet. Sie eignet sich insbesondere für Systeme, bei denen sich die magnetischen Momente senkrecht zum anliegenden Feld ausrichten.

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten UHV-System ist nur ein Aufbau in polarer und in longitudinaler Geometrie möglich. Bei einem Vergleich des in den verschiedenen Geometrien gemessenen Kerr- Signals ist zu beachten, daß die verschiedenen Geometrien unterschiedlich sensitiv auf das gleiche magnetische Moment sind (siehe z.B. [19, 43]). Dies ist, wie schon erwähnt, eine Folge der drei Komponenten des Voigt- Vektors. Die Anwendungsmöglichkeiten und der Informationsinhalt des MOKE hängen sehr stark von der experimentellen Realisierung ab (Kerr-Mikroskopie [44], nichtlineare Realisierungen (MOKE zweiter Ordnung etc. [45]), Kerr-Spektroskopie [38], Suszeptibilitätsmethode [46, 47] und die verschiedenen Arten der Kerr- Ellipsometrie [48]). Im

Folgendes wird nur das in dieser Arbeit verwendete Kerr- Ellipsometer beschrieben. Das Kerr-Spektrometer wurde, um die in Kapitel 6 gezeigten Messungen durchführen zu können, mit dem Ziel einer Verbesserung der Auflösung umgebaut (siehe Anhang B, Ref. [16]).

Es handelt sich bei dem neu aufgebautem Ellipsometer um ein Nullellipsometer. Dabei wurde der in Abb. 3.6 gezeigte Versuchsaufbau verwendet. Er zeichnet sich durch seine einfache Realisierbarkeit bei einer gleichzeitig hohen Auflösung aus (Ref. [48, 49] und Anhang B). Mit diesem Verfahren wird die Kerr-Elliptizität gemessen. Zum

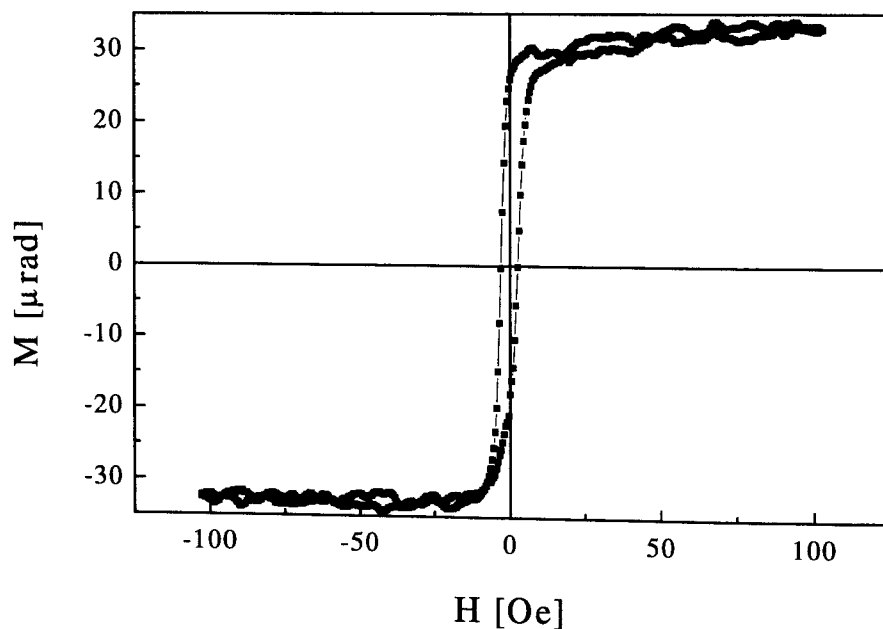


Abbildung 3.7: Typische MOKE-Messung für einen Fe/Ni/Cu(001)-Film. Die Messung wurde bei einer Temperatur von 110 K an einem 8,5 ML dicken Fe-Film auf 7 ML Ni auf Cu(001) durchgeführt. Das Meßsignal hat ein Rauschen von $1,8 \mu\text{rad}$.

Verständnis des Funktionsprinzips siehe z.B. Ref.[48, 49]. Durch eine Variation der Magnetfeldstärke ist es möglich Hysteresekurven aufzunehmen. Die Kerr- Elliptizität ist für dünne Übergangsmetallfilme (Fe, Ni, Co, Mn) proportional zur Magnetisierung [38]. Daher ist es möglich mit Hilfe von Hysteresekurven die Sättigungsmagnetisierung,

die Remanenz und die Koerzitivfeldstärke zu bestimmen. Mit dem in Abb. 3.6 dargestellten Aufbau sind Lichtintensitäten meßbar. Die Kerr-Elliptizität ergibt sich aus den verschiedenen gemessenen Intensitäten wie folgt:

$$\epsilon_K = \frac{\Delta I}{\bar{I} - I_A} \frac{\Delta\theta}{4} \quad (3.3.3.4)$$

Dabei ist I_A die minimale Intensität, die im Nullfeld bei gekreuzter Stellung der Polarisationsfilter gemessen wird, d.h. bei Auslöschung. Das Nullfeld ist das Magnetfeld, daß ohne den Elektromagneten am Ort der Probe anliegt. \bar{I} ist die Intensität für eine Messung im Nullfeld bei einer Verdrehung des Analysators gegen die Stellung im Minimum um den Winkel $\Delta\theta$. ΔI ist der Intensitätsunterschied zwischen der Messung von \bar{I} und der aktuellen Messung während der Aufnahme einer Hysteresekurve. Siehe zur Ableitung der Formel z.B. [49].

Anhand von Formel 3.3.3.4 wird im Anhang A die technische Realisierung eines Kerr-Ellipsometers mit hoher Auflösung diskutiert.

Bei den Versuchen, die im Kapitel 6 vorgestellt werden, wurde eine Auflösung erreicht, wie sie in Abb. 3.7 für eine Tieftemperaturmessung gezeigt ist. Aufgrund der im Anhang B beschriebenen Effekte beim Durchtritt des polarisierten Laserstrahls durch die Vakuumfenster war diese Auflösung schlechter als die bei 300 K erreichbare Auflösung. Für einen solchen Versuch ist eine typische Kurve in Abb. 3.8 dargestellt. Man erkennt, daß die Auflösung der Kerr-Elliptizität bei der in Abb. 3.7 dargestellten Messung nur einen Wert von ca. $1,8 \mu\text{rad}$ erreicht, wohingegen die Messung bei 300 K eine Auflösung von ca. $0,3 \mu\text{rad}$ erreicht. Damit ist die bei 110 K erreichte Auflösung um einen Faktor von 10 besser und die bei 300 K um einen Faktor von 60 besser als die beste für ein Fe-System mit dem vorher bestehendem System erreichte Auflösung [16].

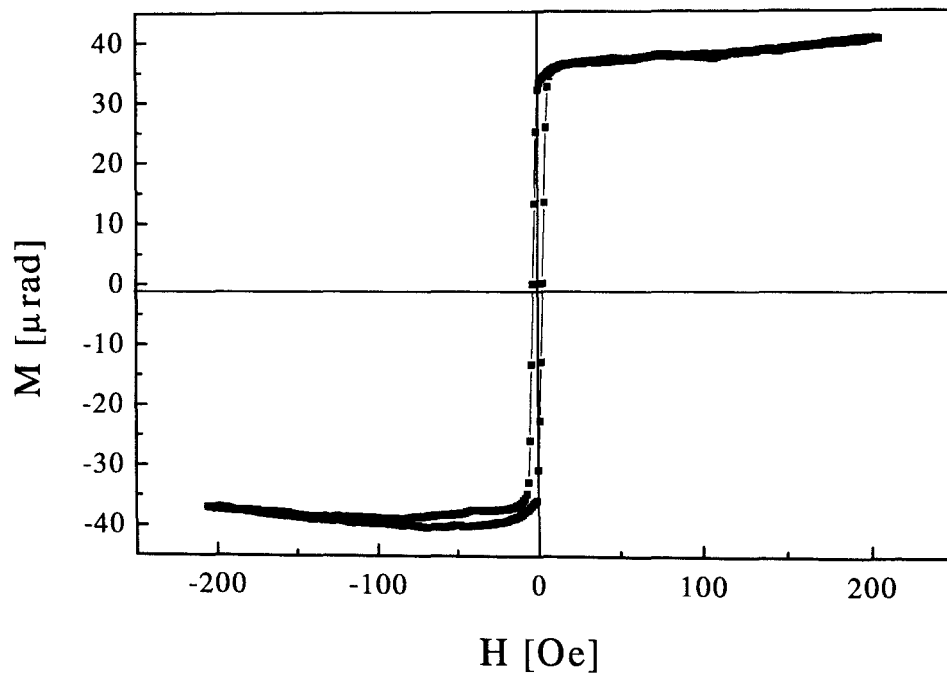


Abbildung 3.8: Die Abbildung zeigt im Vergleich zu Abb. 3.7 eine Messung, wie sie bei einer Temperatur von 300 K durchgeführt wurde. Es handelt sich hierbei um eine Messung, die für einen 2,5 ML dicken Fe-Film vorgenommen wurde. Die Auflösung erreicht hier einen Wert von 0,3 μrad .

3.4 LEED

Zur Abbildung der Struktur und der Morphologie von Oberflächen und dünnen Schichten eignen sich besonders die verschiedenen Beugungs- und Streuverfahren wie z.B. Elektronen- und Röntgenbeugung oder die Ionen- und Atomstreuung (z.B. thermische Helium-Streuung) [50]. Bis auf die thermische Atomstreuung haben sie gegenüber den verschiedenen Rastersondenmethoden den Vorteil, daß sie nicht nur die Oberfläche abbilden, sondern auch strukturelle Information von tieferliegenden Schichten zugänglich machen. Unter diesen verschiedenen Verfahren hat sich als eine Standardmethode zur Untersuchung von einkristallinen Festkörperoberflächen die Beugung niederenergetischer Elektronen („Low Energy Electron Diffraction = LEED“) etabliert (Abb. 3.9). Dieses Verfahren, bei dem typischerweise Elektronen mit einer Energie von 20 bis 500

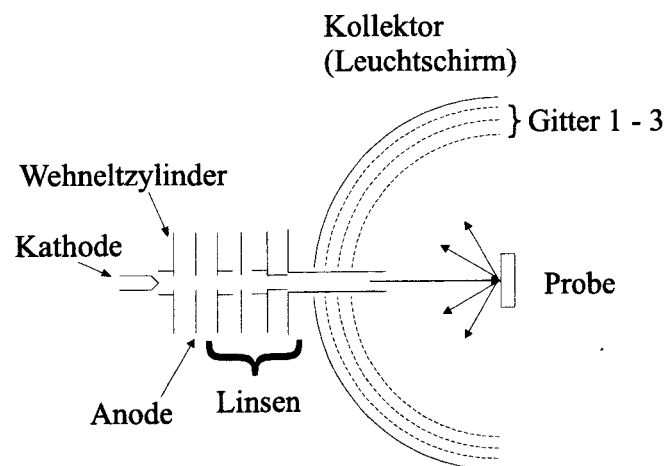


Abbildung 3.9: Die typische Anordnung einer 3-Gitter-LEED Optik. Die Anordnung funktioniert als Gegenfeldanalysator, wobei sich die Probe im Krümmungsmittelpunkt des Leuchtschirms und der Gitter befindet [50].

eV benutzt werden, zeichnet sich durch eine besonders hohe Oberflächenempfindlichkeit aus, da die Elektronen nur eine Eindringtiefe zwischen drei und zehn Atomlagen haben. Zum Verständnis der genauen Funktionsweise des LEED's [51, 52]. Wie Abbildung 3.10 zeigt, können mit Hilfe von LEED verschiedenartige Informationen gewonnen werden. In dieser Arbeit wurde das LEED verwendet, um Auskunft über die Periodizität der untersuchten Oberflächen zu erhalten und um die Strukturparameter zu bestimmen,

d.h. um die Anordnung der Atome in der Einheitszelle zu bestimmen. Dazu wurde die integrale Intensität der Reflexe in Abhängigkeit von der Energie der gebeugten Elektronen aufgenommen. Den dazu verwendeten Meßaufbau zeigt die Abb.3.2.

Nach der Messung der LEED $I(V)$ -Kurven (integrale Intensität in Abhängigkeit der Elektronenenergie) ist die Auswertung der darin enthaltenen Information der zweite wichtige Schritt. Allen Beugungsexperimenten ist der Verlust der Phaseninformation bei den Intensitätsmessungen gemeinsam. Dazu kommt bei der Elektronenstreuung zusätzlich, daß es durch den hohen Wirkungsquerschnitt der Elektronenstreuung zu einer starken Vielfachstreuung kommt. So kann hier im Gegensatz zur Röntgenstreuung die kinematische Theorie nicht verwendet werden. Diese Problematik ist in der Referenz [53] näher erläutert. Es ist daher eine volldynamische Beschreibung des Streuprozesses erforderlich.

Es gibt verschiedene Programmpakte die auf einer volldynamischen Beschreibung basieren. Im folgenden wird beschrieben, wie man mit einem solchen Programm arbeitet. Um aus den LEED $I(V)$ -Kurven die gesuchte strukturelle Information zu gewinnen, muß ein heuristisches Verfahren benutzt werden, da sonst selbst bei den heute zu Verfügung stehenden Rechnern der Rechenaufwand zu groß wäre.

Die Auswertung gliedert sich in drei Schritte (für eine genauere Beschreibung siehe [54, 55]):

1.Schritt: Modellbildung für die unbekannte Struktur.

Es wird ein Modell für die Atomanordnung der unbekannten Struktur aufgestellt, wobei Erfahrungswerte über Bindungslängen und Atomanordnungen aus schon bekannten Strukturen verwendet werden. Dabei wird meistens für besonders sensitive Parameter eine gewisse Variationsbreite zugelassen. Dieser Schritt ist für die folgende Analyse besonders wichtig, da mit einem „falschen“ Startmodell in den nächsten Schritten keine Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht werden kann.

2.Schritt: Für das gewählte Modell werden die Intensitäten der Beugungsreflexe simuliert.

Dazu werden wie schon erwähnt volldynamische Rechnungen verwendet.

3.Schritt: Die Intensitätsspektren ($I(V)$ -Kurven) aus dem Experiment werden mit den Simulationen verglichen.

Zur Beurteilung der Übereinstimmung beider Spektren werden verschiedene Korrelationskoeffizienten, die R-Faktoren („reliability factor“) genannt werden, verwendet. Es gibt eine Vielzahl von verschiedenen R-Faktoren, die unterschiedliche Kriterien verwen-

den. Für einen Überblick siehe z.B. die Referenzen [51,54]. In dieser Arbeit wird in erster Linie der von Pendry eingeführte R-Faktor (R_P) [56] verwendet, darüberhinaus wurde allerdings auch mit dem Zanazzi-Jona R-Faktor (R_{ZJ}) [57] und dem R_{DE} -Faktor [58] gearbeitet.

Zur Simulation der theoretischen LEED I(V)-Kurven wurde auf eine Version eines FORTRAN-Programmes zurückgegriffen, daß von Moritz entwickelt worden ist und seitdem verbessert wird [59,60]. Die typischen Parameter, die bei dem oben beschriebenen Verfahren variiert wurden, sind der Real- und der Imaginärteil des Inneren Potentials, die Debye-Temperaturen der betrachteten Monolagen (Oberflächen und Volumenlagen), die Zwischenlagenabstände der einzelnen betrachteten Lagen und der nächste Nachbarabstand senkrecht zur Oberflächennormale.

Bei dem Inneren Potential handelt es sich um ein „optisches“ Potential. Dieses Potential besteht somit aus einem Realteil und einem Imaginärteil. Der Realteil beschreibt die mittlere attraktive Wechselwirkung. Der Imaginärteil subsummiert alle inelastischen Prozesse wie Plasmonen- oder Elektron- Loch- Anregungen [61]. Durch die verschiedenen Debye-Temperaturen werden die Temperatureffekte auf die Atompositionen bei den Rechnungen als isotrop berücksichtigt.

Darüberhinaus erlaubt das Programm die Berücksichtigung verschiedener Symmetrien um die Rechenzeit zu minimieren. Die Streuung der Elektronen an den Atomen kann durch bis zu maximal 10 Phasenverschiebungen, die von Bandstrukturechnungen abgeleitet wurden, berücksichtigt werden [62].

Die Rechnungen werden typischerweise dann abgebrochen, wenn durch eine weitere systematische Variation der Parameter kein kleinerer R-Faktor gefunden werden kann. Anhand der theoretisch erwarteten Halbwertsbreite der Intensitätsmaxima von $2 V_{oi}$ (V_{oi} = Imaginärteil des Inneren Potentials) läßt sich die Unsicherheit der Strukturbestimmung abschätzen. So ergibt sich für die Varianz von R_P :

$$\Delta R_P = R_{P,min} * \sqrt{8 * V_{oi} / \Delta E} \quad (3.4.3.1)$$

ΔE ist hierbei der Energiebereich indem sich Experiment und Modell überschneiden. Die so ermittelte Unsicherheit beschränkt sich allerdings auf die untersuchten Modelle. Dies bedeutet, daß alle Modelle, deren R_P um mindestens ΔR_P vom Minimum abweicht, zu verwerfen sind.

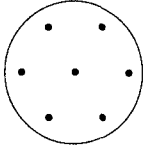
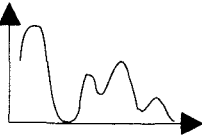
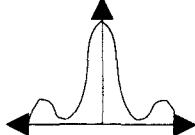
Meßgröße	<div style="border: 1px solid black; padding: 10px; text-align: center;"> Gebeugte Intensität $I = I(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$ </div>		
Benutzte Information	Existenz von Reflexen 	Integrale Intensität der Reflexe 	Intensitätsprofil der Reflexe 
Qualitative Auswertung	Existenz von Periodizitäten	keine	Identifizierung von Defekten
Quantitative Auswertung:	Periodenlängen Einheitsmasche	Nicht zulässig	Anordnung und Größenverteilung von Domänen, Terrassen etc.
kinematisch			
dynamisch		Anordnung der Atome in der Einheitsmasche	Anordnung der Atome an Defekten
	wird in dieser Arbeit verwendet	wird in dieser Arbeit verwendet	

Abbildung 3.10: Eine Übersicht der Informationen, die mit Hilfe des LEED's gewonnen werden können. Zur Auswertung der integralen Intensität benötigt man zusätzlich zum LEED ein Bildverarbeitungssystem. Zur Auswertung der Intensitätsprofile ist ein SPALEED besonders geeignet [50].

Kapitel 4

Dünne Eisenfilme auf Cu_3Au

Bei den kfz Fe-Phasen, die in dem Schichtdickenbereich von 0 bis 11 ML für Fe auf Cu(100) stabilisiert werden können, handelt es sich um metastabile Phasen. Die energetisch günstigere Phase ist eine krz-Phase. Daraus ergibt sich die Frage, unter welchen Bedingungen kann einerseits eine kfz- und andererseits die krz-Phase des Fe stabilisiert werden.

Wie Abb. 4.1 zeigt, kann in Abhängigkeit des Gitterparameters des Substrates Fe sowohl in einer krz als auch in einer kfz-Phase pseudomorph auf einer kfz(001) Oberfläche aufwachsen. Wenn man das zu erwartende Wachstum durch eine Minimierung der elastischen Verspannungen ermitteln möchte, ist der kleinere Misfit das entscheidende Kriterium. Der nächste Nachbarabstand der krz Fe-Phase beträgt $2,87 \text{ \AA}$ und der FM kfz Fe-Phase $2,57 \text{ \AA}$. Wenn man das Substrat so wählt, daß der nächste Nachbarabstand zwischen diesen beiden Werten liegt, ergibt sich die Möglichkeit die thermodynamische Beschreibung der funktionalen Eigenschaften dünner magnetischer Filme durch die Bestimmung des Übergangs von der kfz- zur krz- Struktur zu testen. In Abb. 4.2 ist nun für verschiedene Substrate der nächste Nachbarabstand und die Struktur der Fe-Schichten, die darauf gewachsen wurden, dargestellt. Dabei zeigt sich, daß die Struktur von Fe-Schichten, die auf Substraten mit nächsten Nachbarabständen zwischen denen von Cu und Rh gewachsen wurden, bisher nicht mit geeigneten Methoden charakterisiert wurden. Bei den Untersuchungen für Fe auf Cu(100) zeigte sich die aus Abschnitt 2.4 bekannte Struktur. Für Fe auf Rh(100) wurde mit LEED I(V) Untersuchungen eine tetragonal verzerrte krz Struktur gefunden [63]. Die Struktur von Fe auf Cu_3Au wurde bisher nur mit kinematischem LEED I(V) untersucht. Damit lassen sich wie im

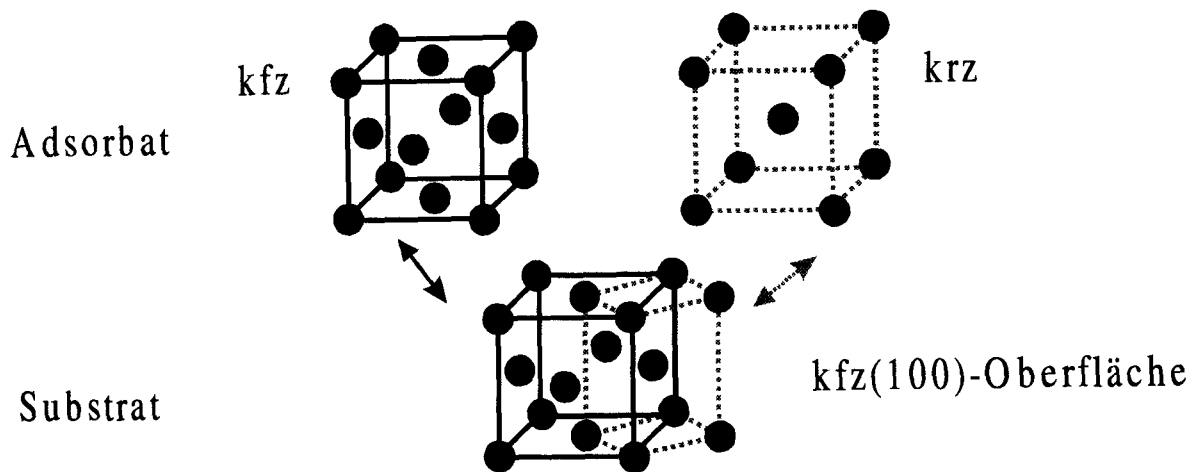


Abbildung 4.1: Stabilisierung von kfz - und krz -Strukturen auf einer $\text{kfz}(001)$ Oberfläche. Es lassen sich auf einer $\text{kfz}(100)$ Oberfläche in Abhängigkeit von den nächsten Nachbarabständen sowohl kfz - als auch krz -Strukturen stabilisieren. Die nächsten Nachbarabstände unterscheiden sich um den Faktor $\sqrt{2}$.

Abschnitt 3.4 beschrieben allerdings keine eindeutigen Aussagen treffen [64, 65]. Die $\text{Cu}_3\text{Au}(001)$ Oberfläche bietet sich aufgrund ihres günstigen Gitterparameters für eine Untersuchung an, die das Ziel hat, die Grenzen der metastabilen Epitaxie zu fixieren. Der Gitterparameter von Cu_3Au beträgt $2,65 \text{ \AA}$.

Bei Cu_3Au handelt es sich um einen Legierungskristall. Dies verkompliziert durch auftretende Ordnungs- und Unordnungsphänomene sowohl die Präparation als auch das Experiment. Beides ist in der Ref. [16] ausführlich beschrieben, ist allerdings für die Interpretation der Strukturergebnisse weitgehend ohne Bedeutung. An den Stellen, an denen eine solche Betrachtung sinnvoll ist, werden dann allerdings Au und Cu getrennt behandelt.

4.1 Wachstum und Morphologie

Bevor auf die LEED I(V)-Untersuchungen zur Bestimmung der Fe-Struktur auf Cu_3Au eingegangen wird, ist es notwendig Ergebnisse von B. Feldmann zur Diffusion von Cu und Au zu referieren. Bei diesen Untersuchungen, die in Ref. [16, 66] geschildert werden, zeigt sich, daß bis zu Fe-Schichtdicken von $1,5 \text{ ML}$ bei 300 K sowohl Cu als auch Au aus dem Substrat an die Oberfläche diffundieren. Dieses wird vermieden, wenn Fe

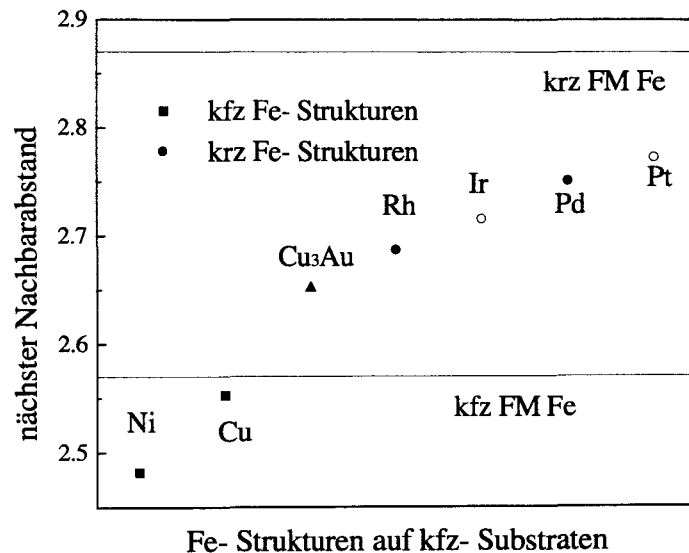


Abbildung 4.2: Struktur von Fe- Filmen als Funktion des nächsten Nachbarabstandes des Substrats in der Ebene. Durch volldynamische LEED I(V)- Studien konnten bisher die Strukturen von Fe- Filmen auf verschiedenen kfz- Substraten (Ni, Cu, Rh und Pd) bestimmt werden. Für Fe auf Cu₃ (das Dreieck), Ir und Pt gibt es bisher keine volldynamischen LEED I(V)- Studien. Die durchgezogenen Linien markieren den nächsten Nachbarabstand in der Ebene die kfz- und krz- Eisenvolumenphasen.

bei 150 K aufgewachsen wird. Durch eine Deposition bei 150 K erhöht sich allerdings die Oberflächenrauigkeit gegenüber der Deposition bei 300 K. Bei den Untersuchungen von Feldmann et al. [66] hat sich gezeigt, daß die gesamte Rauigkeit sowohl für die Oberfläche als auch die Grenzfläche bei einer Herstellungstemperatur von 150 K für die ersten 2 ML und 300 K für alle weiteren Fe-Lagen minimal ist. Diese Untersuchungen wurden mit MEED in Abhängigkeit von der Temperatur durchgeführt, um das Wachstum der Fe-Filme zu charakterisieren. Dabei zeigen sich beim Wachstum von Fe auf Cu₃Au bei Temperaturen um 150 K keine MEED Oszillationen. Beim Wachstum bei 300 K ergeben sich MEED Oszillationen nur im Schichtdickenbereich zwischen 2 und 6 ML. Dies zeigt, daß in diesem Schichtdickenbereich die Stufendichte oszilliert. Eine Oszillation der Stufendichte ist ein Anzeichen für lagenweises Wachstum.

4.2 Struktur

Die Struktur wurde zuerst qualitativ mit Hilfe von LEED Bildern (Abb.4.3) und dann quantitativ durch volldynamische LEED I(V)- Studien untersucht. Bei diesen Studien ist insbesondere der Schichtdickenbereich bis 5 ML interessant. Die oben schon erwähnte kinematische LEED I(V)-Studie findet für dünne Fe-Schichten bis ca. 5 ML eine kfz- Struktur und darüber eine krz- Struktur, die zuerst tetragonal verzerrt ist und die für größere Schichtdicken der krz- Volumenstruktur des Fe immer ähnlicher wird. Ein besonderes Merkmal der LEED-Bilder für kleine Fe-Schichtdicken ist, daß sowohl für Tieftemperaturpräparation (150 K) als auch für Raumtemperaturpräparation für Schichtdicken bis 4,8 bzw. 5,4 ML Überstrukturen sichtbar sind. Es ist dabei allerdings nicht geklärt, ob diese Überstrukturen durch eine Korrugation oder durch andere Gründe verursacht werden [16, 66, 67].

4.2.1 Rechnungen

Ausgehend von diesen qualitativen Aussagen bzgl. der Struktur durch die LEED-Bilder wurden für die verschiedenen Schichtdicken quantitative LEED I(V)-Analysen durchgeführt. Da das Ziel der Untersuchung war zu testen, ob auf dem Substrat Cu_3Au mit dem nächsten Nachbarabstand von $2,65 \text{ \AA}$ für dünnen Fe-Schichten eine krz oder eine kfz Fe-Struktur stabilisiert wird, wurden zur quantitativen Strukturbestimmung für vier verschiedene Schichtdicken Datensätze von LEED I(V)- Kurven aufgenommen. Diese Schichtdicken sind 3,3 ML, 4,8 ML, 18,7 ML und 53 ML. Die Schichtdicken wurden so ausgewählt, daß sowohl der Schichtdickenbereich bis 5 ML als auch der Bereich abgedeckt war, in dem sicher eine krz- Struktur erwartet werden konnte (größer 20 ML). In dem Bereich bis 5 ML sollte nach Lin et al. [64] eine kfz- Struktur vorliegen. Außerdem wurden bei der Präparation der vier verschiedenen Filme die Präparationsbedingungen variiert. So sollte neben der Bestimmung des Einflusses der Fe-Schichtdicke auch der Einfluß der verschiedenen Präparationsbedingungen und damit der Einfluß der Interdiffusion auf die Struktur bestimmt werden. Für LEED I(V)- Untersuchungen ist es immer günstiger, wenn das Anfangsmodell die Struktur schon sehr gut beschreibt. Auch ist zu erwarten, daß der 53 ML- Film eine Struktur hat, die der krz- Volumenstruktur des Fe sehr nahe kommt. Die Differenz zur krz- Volumenstruktur sollte für kleine Fe- Schichtdicken am größten sein. Daher werden im

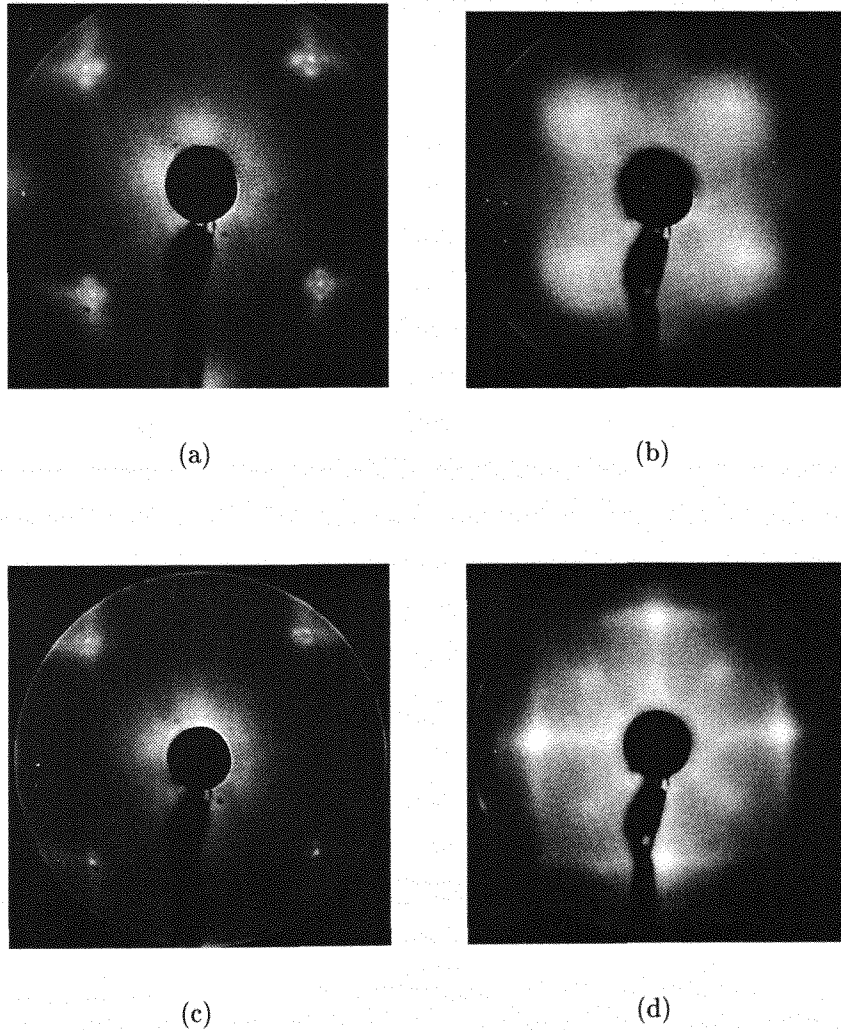


Abbildung 4.3: LEED-Bilder als Funktion der Fe- Schichtdicke für zwei Wachstumstemperaturen (T_W). Bild (a) zeigt einen 2,2 ML dicken Fe-Film ($T_W=150$ K) bei einer Energie von 58 eV und Bild (b) einen 4,9 ML dicken Film ($T_W=150$ K) bei 103,5 eV. Bild (c) zeigt einen 2,7 ML Film ($T_W=300$ K) bei 50 eV und Bild (d) einen 5,0 ML Film ($T_W=300$ K) bei 150 eV. Die Überstruktur- Reflexe in den Bildern (a) und (c) entsprechen einer $(n\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45$ - oder einer $(n\sqrt{2} \times n\sqrt{2})R45$ Struktur mit $n=13-14$ [66].

folgenden die LEED I(V)- Untersuchungen mit abnehmender Schichtdicke vorgenommen und präsentiert.

Der 53 ML dicke Film wurde bei 300 K aufgewachsen und anschließend auf 470 K

erwärmt. Bei dieser Schichtdicke sollte die Interdiffusion von Cu und Au in den Fe-Film im Temperaturbereich zwischen 300 und 470 K keine Rolle spielen, da davon nur die ersten 3 ML des Fe-Films betroffen sein sollten [66]. Durch die Interdiffusion verursachte Verspannungen sollten ebenfalls auf die Struktur der ersten Atomlagen, auf die die LEED I(V)-Analyse sensitiv ist, keinen Einfluß haben. Das Heizen der Probe nach der Deposition dient dazu, die Oberfläche durch Oberflächendiffusion zu glätten. Die zweite Schicht wurde ebenfalls bei 300 K aufgewachsen. Allerdings wurde sie nach der Präparation nicht weiter geheizt. Der 4,8 ML dicke Film wurde in zwei Schritten aufgewachsen. Die ersten zwei ML wurden bei 150 K aufgewachsen, um die Interdiffusion von Cu und Au in den Fe-Film zu verhindern. Die weiteren 2,8 ML wurden bei 300 K aufgewachsen und danach wurde der Film auf 470 K geheizt, um durch Oberflächendiffusion die Oberfläche zu glätten. Der 3,3 ML dicke Fe-Film wurde in einer ähnlichen Prozedur in zwei Schritten aufgewachsen. Dazu wurden die ersten 1,2 ML bei 150 K aufgewachsen und die restlichen 2,1 ML bei 300 K. Allerdings wurde der Film nicht weiter getempert, um den Einfluß der Interdiffusion, der in diesem Schichtdickenbereich von entscheidender Bedeutung ist, zu minimieren.

Die LEED I(V)-Analysen wurden analog zu der im Abschnitt 3.4 dargestellten Prozedur vorgenommen. Dabei wurden zwei verschiedene Gruppen von Parametern variiert. Die erste beinhaltet strukturelle Parameter. Zu dieser Gruppe gehören die Zwischenlagenabstände und der nächste Nachbarabstand in der Oberfläche (a_p). Hierbei wurde auch der Volumenzwischenschichtabstand optimiert. Die präzise Bestimmung dieser Parameter ist entscheidend für die Bestimmung der Struktur von dünnen Filmen. Die zweite Gruppe beinhaltet die unabhängige Optimierung sowohl des Real- als auch des Imaginärteils des Potentials und der Debyetemperaturen aller zur Modellbildung verwendeten Oberflächenlagen als auch der verwendeten Volumenlagen. Zur Frage der Modellbildung möchte ich an dieser Stelle auf den Abschnitt 3.4 verweisen, in dem ausführlicher auf die Modellbildung bei der verwendeten LEED Software eingegangen wird.

Da der Manipulator zur Positionierung des Cu_3Au -Kristalls nur zwei Freiheitsgrade der Rotation hat, ist es nicht möglich den Kristall so auszurichten, daß die Oberflächennormale parallel zur Einfallrichtung des Elektronenstrahls ist. Die daraus resultierende Verkipfung des Kristalls (Tilt) ist zur vollständigen Durchführung der Strukturanalyse zu bestimmen. Dies ergab für den Tilt der vier untersuchten Filme einen Wert von $1,35^\circ \pm 0,2^\circ$.

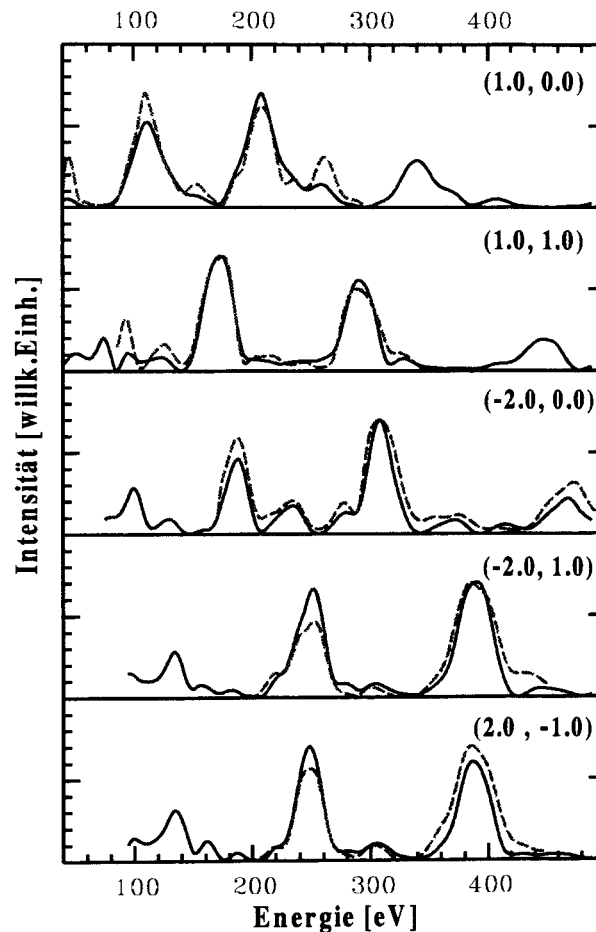


Abbildung 4.4: Vergleich der aus dem besten Modell berechneten LEED I(V)-Kurven (durchgezogene Linie) mit den experimentellen I(V)-Kurven (gestrichelte Linie). Der Fe-Film wurde bei 300 K aufgewachsen und nach der Deposition auf 470 K geheizt. Sowohl die Peakpositionen als auch die Peakformen zeigen eine gute Übereinstimmung.

Die Bestimmung der Fehler wurde mit den im Abschnitt 3.4 dargestellten Formeln 2.1.2.5 vorgenommen. Der Energieüberlapp zwischen Modell und experimentell gemessenen LEED I(V)-Kurven betrug für den 53 ML dicken Film 2680 eV, für den 18,7 ML dicken Film 1975 eV, für den 4,8 ML dicken Film 2824 eV und für den 3,3 ML dicken Film 2832 eV.

Die Abb. 4.4 zeigt für den 53 ML Fe-Film die experimentellen LEED I(V)-Kurven im Vergleich mit den aus dem besten Modell errechneten LEED I(V)-Kurven. Dabei wurde ein Modell mit zwei Oberflächenlagen und einer Volumenlage verwendet. Der Vergleich

des Modells mit den experimentellen Daten zeigt eine gute Übereinstimmung sowohl bei der Kurvenform als auch bei den Peakpositionen. Diese gute Übereinstimmung drückt sich auch in den niedrigen R-Faktoren aus. Die zu diesem Modell gehörigen Parameter sind in Tabelle 4.1 dargestellt. Es ergeben sich dabei die folgenden Strukturparameter für optimales R_p : $d_{12} = 1,48 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $d_{23} = 1,47 \pm 0,02 \text{ \AA}$, $d_b = 1,455 \pm 0,02 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,86 \pm 0,05 \text{ \AA}$. Diese Struktur entspricht innerhalb der Fehler sehr gut der Struktur von krz- Fe ($d_b = 1,435 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,87 \text{ \AA}$). Das beste Modell für die Optimierung von R_{DE} stimmt sehr gut mit diesem überein. Die Abweichungen sind kleiner gleich $0,01 \text{ \AA}$. Damit entspricht die aus dieser LEED I(V)-Analyse bestimmte Struktur sehr gut den Erwartungen für große Schichtdicken.

Der Vergleich zwischen dem besten Modell und den experimentellen LEED I(V)-Kurven für den 18,7 ML dicken Fe-Film wird in Abb. 4.5 gezeigt. Dieser Film wurde nach der Präparation nicht geheizt. Dies führt zu einer höheren Oberflächenrauigkeit, so daß die Intensität der I(V) Spots ab- und die Breite der Spots zunimmt. Dieses ist mit einer Verminderung der Qualität der experimentellen LEED I(V)-Kurven gleichzusetzen. Der Einfluß dieser Qualitätsminderung ist besonders deutlich bemerkbar bei

Tabelle 4.1: Strukturdaten der Fe- Filme auf Cu₃Au als Funktion der Fe- Schichtdicke. d_{ij} sind die Zwischenlagenabstände zwischen der i-ten und der j-ten Lage. Θ_{Di} ist die Debyetemperatur der i-ten Lage und a_p der nächste Nachbarabstand in der Schichtebene. Der Index b bezeichnet jeweils die Parameter der Volumenlage des Modells. ΔE ist der Überschneidungsbereich von Theorie und Experiment.

Parameter	3,3 ML	4,8 ML	18,7 ML	53 ML
R_p	0,307	0,294	0,270	0,271
$d_{12} [\text{\AA}]$	$1,57 \pm 0,03$	$1,56 \pm 0,02$	$1,45 \pm 0,02$	$1,48 \pm 0,03$
$d_{23} [\text{\AA}]$	$1,51 \pm 0,03$	$1,505 \pm 0,02$	$1,48 \pm 0,03$	$1,47 \pm 0,02$
$d_b [\text{\AA}]$	$1,53 \pm 0,05$	$1,51 \pm 0,025$	$1,46 \pm 0,03$	$1,455 \pm 0,02$
$a_p [\text{\AA}]$	$2,72 \pm 0,06$	$2,74 \pm 0,055$	$2,83 \pm 0,055$	$2,86 \pm 0,05$
$\Theta_{D1} [\text{K}]$	480	300	460	400
$\Theta_{D2} [\text{K}]$	520	470	470	400
$\Theta_{Db} [\text{K}]$	520	500	550	400
$\Delta E [\text{eV}]$	2832	2824	1975	2680

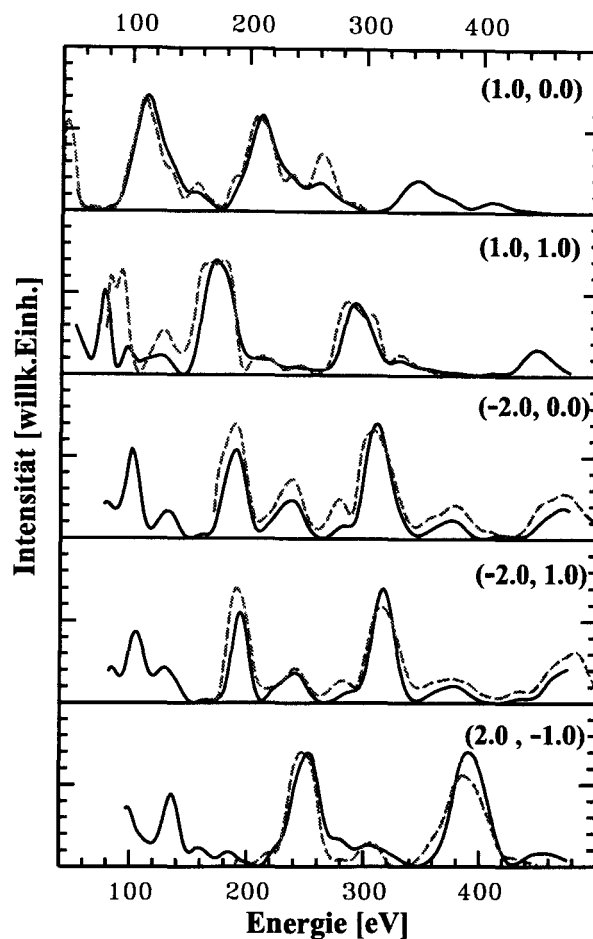


Abbildung 4.5: Vergleich der experimentellen LEED $I(V)$ -Kurven (gestrichelte Linie) des 18,7 ML dicken Fe-Films mit den sich aus dem besten Modell ergebenden $I(V)$ -Kurven (durchgezogene Linie). Der Film wurde bei 300 K aufgewachsen. Alle Kurven mit Ausnahme des (1,1)-Reflexes zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment.

hohen Energien. Es treten dort Schwierigkeiten bei der Messung der $I(V)$ -Kurven auf. Aus diesem Grund wurde für diese Schichtdicke nur ein kleinerer experimenteller Datensatz gemessen. Dadurch ergibt sich eine größere Ungenauigkeit bei der Bestimmung der Parameter (siehe Formel 3.4.3.1). Es zeigt sich allerdings, daß die Abweichung zwischen den experimentellen Kurven und den errechneten Kurven vergleichbar ist mit den Abweichungen für die 53 ML Schicht, was sich auch in den R-Faktoren ausdrückt, die für den 18,7 ML Film fast identisch mit denen für die 53 ML Schicht sind. Als

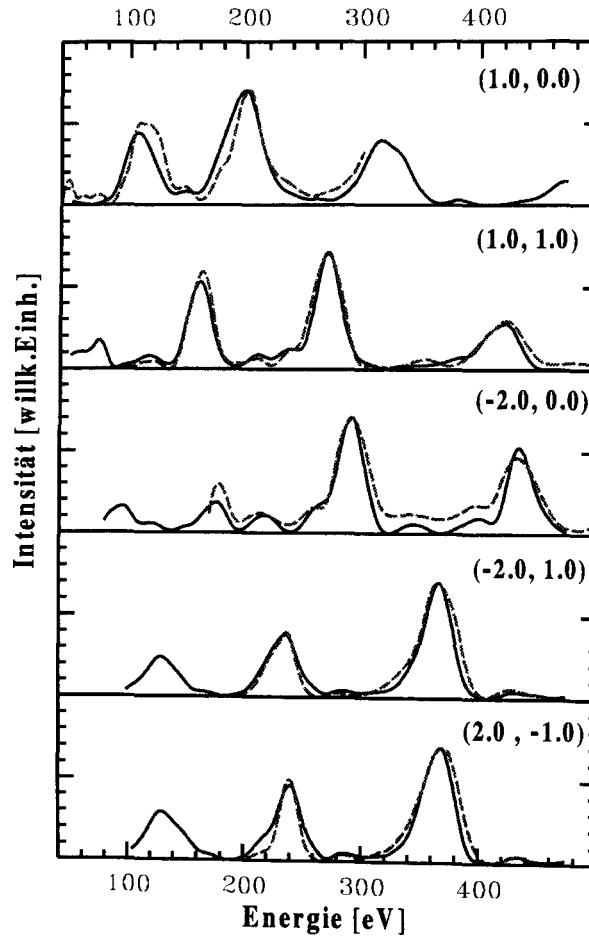


Abbildung 4.6: Gegenüberstellung der experimentellen $I(V)$ -Kurven (gestrichelte Linie) für den 4,8 ML dicken Fe-Film mit den aus dem besten Modell berechneten $I(V)$ -Kurven (durchgezogene Linie).

strukturelle Parameter ergeben sich $d_{12} = 1,45 \pm 0,02 \text{ \AA}$, $d_{23} = 1,48 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $d_b = 1,46 \pm 0,03 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,83 \pm 0,055 \text{ \AA}$. Auch diese Struktur kommt der krz Struktur von Fe sehr nahe. Allerdings ist die Struktur des 18,7 ML dicken Films leicht gegenüber der krz Struktur des Fe tetragonal verzerrt, wobei der nächste Nachbarabstand in der Ebene kontrahiert und der Volumenzwischenlagenabstand expandiert ist.

Auch der Vergleich der experimentellen mit den theoretischen $I(V)$ -Daten für die 4,8 ML dicke Fe-Schicht zeigt eine gute Übereinstimmung (siehe dazu Abb. 4.6). Dies ist umso bemerkenswerter, da bei dieser Schicht das gewählte semifinite Modell aufgrund der geringen Schichtdicke im Vergleich zu den beiden anderen Filmen schlechter ist.

Auch sollte für den 4,8 ML Film der Einfluß der Grenzfläche merklich sein. Die gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment führt dazu, daß der Fehler für d_b mit $\pm 0,025 \text{ \AA}$ die gleiche Größe hat, wie für den 18,7 ML Fe-Film. Für die Struktur ergeben sich die folgenden Parameter $d_{12} = 1,56 \pm 0,02 \text{ \AA}$, $d_{23} = 1,505 \pm 0,02 \text{ \AA}$, $d_b = 1,51 \pm 0,025 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,74 \pm 0,055 \text{ \AA}$. Dies zeigt, daß die tetragonale Verzerrung im Vergleich zur 18,7 ML dicken Fe-Schicht deutlich zugenommen hat. Zudem wächst der Fe-Film bei 4,8 ML noch nicht pseudomorph auf.

Die Modellbildung zur Bestimmung der theoretischen LEED $I(V)$ -Kurven ist für dünne

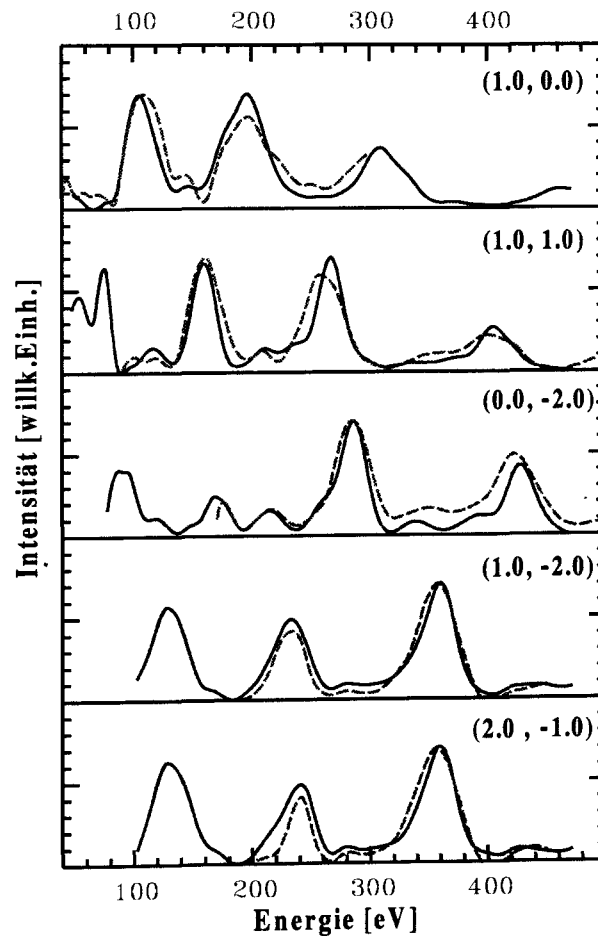


Abbildung 4.7: Vergleich der experimentellen $I(V)$ -Kurven (gestrichelte Linie) für einen 3,3 ML dicken Fe-Film mit den theoretischen Kurven. Die ersten 1,2 ML wurden bei 150 K aufgewachsen, um den Einfluß der Interdiffusion zu minimieren, und die weiteren 2,1 ML bei 300 K.

Filme wie den 3,3 ML dicken Fe-Film deutlich schwieriger. Dies gilt insbesondere, wenn wie in diesem Fall eine Interdiffusion an der Grenzfläche nicht ausgeschlossen werden kann. Erschwerend kommt dazu, daß es sich als äußerst schwierig herausgestellt hat, LEED I(V)-Kurven von Cu_3Au erfolgreich zu simulieren. Es ist bis heute noch nicht gelungen, in volldynamischen LEED I(V)-Analysen die Struktur der Oberfläche eines Cu_3Au -Einkristalls zweifelsfrei zu bestimmen.

Daher wurde auch für die 3,3 ML dicke Fe-Schicht das semifinite Modell zur Beschreibung der Struktur des Fe-Films benutzt. Es wurde in dem Modell also wieder nur von zwei Oberflächenlagen ausgegangen. Alle darunterliegenden Lagen wurden durch eine Volumenlage approximiert. Daher erstaunt es besonders, daß der Vergleich zwischen Experiment und Modell (siehe Abb. 4.7) eine nur leichte Verschlechterung im R_p -Faktor im Vergleich mit den bisher untersuchten Schichten zeigt. Allerdings ergibt sich hier eine deutliche Vergrößerung des Fehlers bei der Bestimmung der Strukturparameter im Vergleich zu den Schichten mit dickerem Fe-Film. So ergeben sich hier für die optimalen Strukturparameter die folgenden Werte $d_{12} = 1,57 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $d_{23} = 1,51 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $d_b = 1,53 \pm 0,05 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,72 \pm 0,06 \text{ \AA}$. Wiederum ist eine deutliche Zunahme der tetragonalen Verzerrung zu erkennen und auch hier wächst der Fe-Film nicht pseudomorph auf. Der nächste Nachbarabstand in der Ebene ist wieder deutlich größer als der nächste Nachbarabstand des Substrats von $2,65 \text{ \AA}$.

Um die Güte der durchgeführten LEED I(V)-Analysen veranschaulichen zu können, sind in Abb. 4.8 die Variationen von R_p in Abhängigkeit der strukturellen Parameter dargestellt. Dabei zeigt sich, daß die Breite der Minima für den 3,3 ML dicken Film deutlich größer ist als für die anderen Schichtdicken. Mit dieser Darstellung wurden auch die Fehlerbalken für die Strukturbestimmung ermittelt.

Auf der Grundlage dieser Daten wird im folgenden der Grundzustand der Fe-Filme auf Cu_3Au diskutiert werden. Bei dieser Diskussion stellt sich insbesondere die Frage, ob dieser Grundzustand einer krz- oder einer kfz-Struktur entspricht und wie der Einfluß der durch den Misfit erzeugten elastischen Verspannungen beschrieben werden kann.

4.2.2 Einordnung und Diskussion

Bevor in diesem Abschnitt die strukturellen Parameter der Fe-Filme auf Cu_3Au diskutiert werden, möchte ich die Ergebnisse der Studien anderer Gruppen vorstellen. Es gab in den letzten Jahren zwei Studien, die mit Hilfe von kinematischen LEED I(V)-

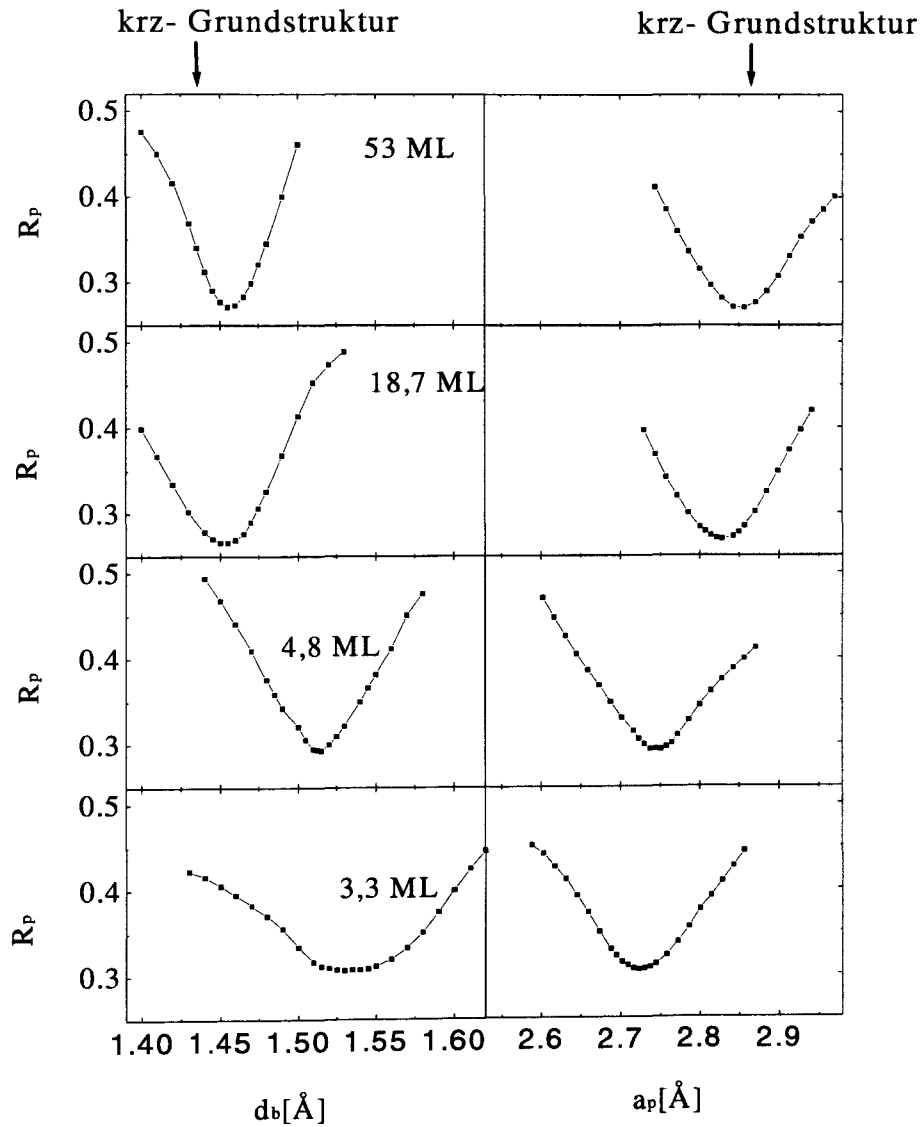


Abbildung 4.8: Abhängigkeit der R_p -Faktoren von den Interlagenabständen der Volumenlage (d_b) und den nächsten Nachbarabständen in der Ebene (a_p). Die scharfen Minima für die 53 ML, 18,7 ML und 4,8 ML dicken Fe-Filme erlauben eine präzise Bestimmung der strukturellen Größen. Die breiteren Minima für die 3,3 ML dicke Schicht führen zu größeren Fehlerbalken sowohl für d_b als auch für a_p .

Studien des (0,0)-Spots die Struktur von Fe auf Cu_3Au untersucht haben [64, 65]. Diese Studien kommen zum Ergebnis, daß wenige Atomlagen Fe bis zu Schichtdicken von 5,5 ML [64] in einer kfz- Struktur aufwachsen. Oberhalb dieser Schichtdicke kommt es zu einem Phasenübergang in eine tetragonal verzerrte krz Phase, die zu großen Schichtdicken hin zu der krz Struktur des Volumen Fe relaxiert. Nach der Studie von Lin et al. [64] ist diese Änderung der strukturellen Eigenschaften mit einem Spinreorientierungsübergang von senkrechter Magnetisierung zu einer in der Ebene verknüpft.

Magnetische Untersuchungen an dem gleichen System wurden außerdem von Feldmann et al. [66] durchgeführt. Hierbei wurde ebenfalls ein Spinreorientierungsübergang gefunden. Die Übergangsschichtdicke ist dabei abhängig von der Temperatur, bei der der Film gewachsen wurde. Diese Temperaturabhängigkeit konnte in dieser Arbeit mit Veränderungen der Grenzflächenrauhigkeit und damit mit dem Einfluß der Diffusion an der Grenzfläche zwischen Substrat und Fe-Film erklärt werden. Die Studie [66] wurde unter den gleichen Präparationsbedingungen durchgeführt und außerdem wurde auch die gleiche Schichtdickeneichung verwendet, wie bei der hier gezeigten Arbeit. Falls eine Phasenumwandlung zwischen einer kfz und einer krz Phase gefunden wird, ist es daher sinnvoll die Schichtdicken für beide Übergänge zu vergleichen. So wäre es dann möglich eine Korrelation zwischen den beiden Übergängen aufzuzeigen.

Bei der Analyse der strukturellen Phase, d.h. bei der Frage, ob eine krz- oder eine kfz- Struktur vorliegt, ist für Filme mit einer Schichtdicke von wenigen Atomlagen, wie es hier der Fall ist, das entscheidende Kriterium das c/a -Verhältnis. c bezeichnet hierbei den doppelten Zwischengitterabstand und a den nächsten Nachbarabstand senkrecht zur Oberflächennormalen. Dieses Verhältnis beträgt für eine kfz Struktur $\sqrt{2}$ und für eine krz Struktur 1. Darüber hinaus kann man anhand der elastischen Theorie vor-

Tabelle 4.2: Elastische und strukturelle Daten der Fe- Grundzustände. Es wurde hierbei angenommen, daß die elastischen Eigenschaften der ferro- und der antiferromagnetischen kfz- Phasen sich nicht unterscheiden [68, 69].

Struktur	Magnetismus	c_o	a_o	c_{11}	c_{12}
kfz	FM	3,64 Å	2,57 Å	154 GPa	122 GPa
kfz	AFM	3,59 Å	2,53 Å	154 GPa	122 GPa
krz	FM	2,87 Å	2,87 Å	230 GPa	135 GPa

hersagen wie sich dieses Verhältnis ändert, wenn sich der Film elastisch verzerrt (siehe dazu Gleichung 2.1.2.5 im Abschnitt 2.1).

Unsere Arbeit bestätigt die Vermutung der früheren kinematischen LEED I(V) Studien, daß Fe auf Cu₃Au oberhalb von 10 ML in einer krz Struktur aufwächst. Die voll-dynamische Analyse die im vorherigen Kapitel geschildert wurde, reproduziert für den 53 ML dicken Fe-Film mit $a_p = 2,86 \text{ \AA}$ und $d_b = 1,455 \text{ \AA}$ sehr gut die krz Struktur des Volumen Fe. Für den krz Grundzustand würde man ein a_p von $2,87 \text{ \AA}$ und ein d_b von $1,435 \text{ \AA}$ erhalten. Auch die Oberflächenlagen des 53 ML dicken Fe-Films sind unter Berücksichtigung des Fehlers nur unwesentlich gegenüber der idealen krz Struktur expandiert (siehe Tab. 4.1). Für den 18,7 ML dicken Fe-Film finden wir ähnliche Werte für a_p mit $2,83 \text{ \AA}$ und für d_b mit $1,46 \text{ \AA}$. Dies entspricht innerhalb des Fehlers sehr gut der krz Struktur. Für den 18,7 ML dicken Fe-Film ist allerdings schon ein leichter Trend zu einer tetragonalen Verzerrung erkennbar. Auch hier entspricht der gesamte Film, d.h. einschließlich der beiden Oberflächenlagen, der krz-Struktur.

Für dünnere Fe-Filme (3,3 und 4,8 ML) können unsere Ergebnisse die Vermutungen der früheren kinematischen LEED I(V)-Studien nicht bestätigen. Nach dem Strukturmodell, daß in den früheren Studien vorgeschlagen wurde, sollten Fe-Filme bis zu einer Schichtdicke von ca. 5,5 ML eine tetragonal verzerrte kfz-Struktur haben. Diese Struktur und die Übergangsschichtdicke zur krz-Struktur sollten von den Präparationsbedingungen abhängen. Der Zwischenlagenabstand für diese tetragonal verzerrte kfz-Struktur sollte im Bereich zwischen $1,89$ und $1,98 \text{ \AA}$ liegen. a_p sollte $2,65 \text{ \AA}$ betragen, d.h. die Filme sollten pseudomorph [64] aufwachsen. Dieses Modell widerspricht in allen Punkten unseren Ergebnissen.

Eine voll-dynamische LEED I(V)-Analyse ist einer kinematischen bzgl. der Aussagekraft über strukturelle Parameter klar überlegen [54]. Insbesondere ist die kinematische Analyse-methode nicht eindeutig. Um dies zu demonstrieren und die Plausibilität des Strukturvorschlags von Lin et al. zu testen, wurde ein direkter Vergleich zwischen dem Ergebnis der im vorherigen Abschnitt gezeigten Studie und dem Modell von Lin et al. vorgenommen.

Lin et al. hatten nur den (0,0)-Reflex analysiert. Daher bietet es sich an, in einem ersten Schritt ebenfalls nur den (0,0)-Reflex zu betrachten. Eine Analyse des (0,0)-Reflexes wurde sonst nicht durchgeführt. Der (0,0)-Reflex kann nicht gleichzeitig mit den anderen Reflexen aufgenommen werden, da bei parallelem Einfall des Elektronenstrahls auf den Kristall die Elektronenkanone den (0,0)-Reflex verdeckt. Daher ist es

notwendig diesen Reflex separat mit einer vergrößerten Verkipfung des Kristalls gegen den Elektronenstrahl auszumessen. Aus diesem Grund ist es auch nicht möglich, diesen Reflex bei normalen volldynamischen LEED $I(V)$ -Analysen zu berücksichtigen. Die verwendete Software erlaubt nur, einen einzigen wohldefinierten Tilt zu verwenden. Die Aufnahme der LEED $I(V)$ - Kurve des (0,0)- Reflexes wurde nach der Aufnahme der anderen Kurven durchgeführt, daher ist die Qualität dieser Kurve etwas schlechter als die der anderen.

Für den direkten Vergleich wurde der 3,3 ML dicke Fe- Film ausgewählt.

Zuerst wurde für den Strukturvorschlag von Lin et al. der Vergleich zwischen Modell und der experimentellen $I(V)$ - Kurve durchgeführt. Dabei ergibt sich ein R_p von 0,69. Es wurden bei der Rechnung die folgenden strukturellen Parameter verwendet: $d_{12} = 2,02 \text{ \AA}$, $d_{23} = 1,99 \text{ \AA}$, $d_b = 1,875 \text{ \AA}$ und $a_p = 2,65 \text{ \AA}$. Der hohe R_p - Faktor zeigt, daß das Modell von Lin et al. die experimentellen Befunde äußerst schlecht beschreibt.

Als nächstes wurde auch für die Struktur, die sich aus der Analyse des vollständigen Satzes $I(V)$ - Kurven ergibt (siehe Tab.4.1), der R_p - Faktor für den Vergleich mit der $I(V)$ - Kurve des (0,0)- Reflexes bestimmt. Hierbei ergab sich ein R_p von 0,425. Auch

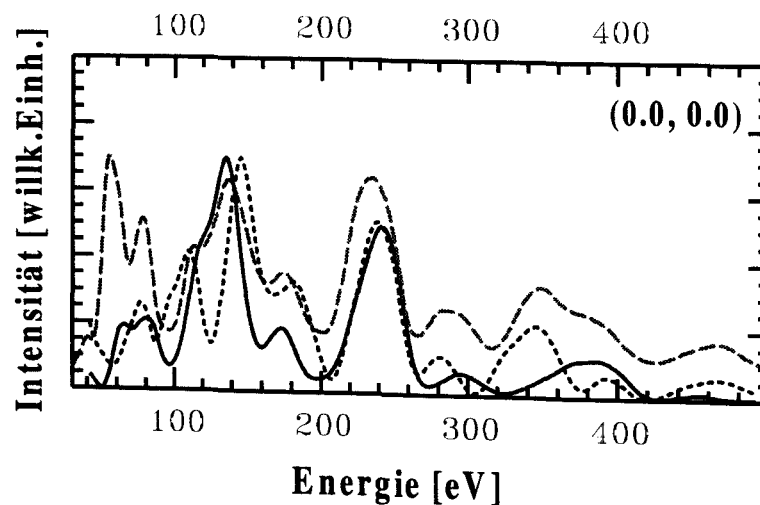


Abbildung 4.9: Die Abbildung zeigt einen Vergleich des kfz- Modells wie es von Lin et al. entwickelt wurde [64] mit dem in Tabelle 4.1 dargestellten Modell für den (0,0)-Reflex des 3,3 ML dicken Fe- Films. Die Linie mit den langen Strichen entspricht den experimentellen Daten, die Linie mit den kurzen Strichen entspricht dem Lin Modell und die durchgezogene Linie dem Modell aus Tab. 4.1.

dieser R- Faktor ist schlecht, aber schon deutlich besser als für das Modell von Lin et al.. Das vergleichsweise schlechte R_p könnte eine Folge der schlechten Qualität der I(V)-Kurve des (0,0)- Reflexes sein.

Für die beiden verschiedenen strukturellen Modelle wurden identische nicht strukturelle Parameter verwendet.

Es ergibt sich bei der Analyse des (0,0)- Reflexes also schon eine klare Präferenz für die Struktur aus Tab. 4.1. Wie an den R-Faktoren und auch an der Abb. 4.9 zu erkennen ist, beschreiben aber beide Modelle das Experiment nicht besonders gut, d.h. die Kurvenformen und die Positionen der Maxima stimmen nicht gut überein. Dabei ist allerdings auch zu berücksichtigen, daß der (0,0)- Reflex keine ausreichende Datenbasis für eine erfolgreiche volldynamische Strukturanalyse darstellt.

Daher ist es sinnvoll in einem zweiten Schritt das Modell von Lin et al. auch am vollständigen Datensatz auszutesten, wie er im vorherigen Abschnitt für die I(V)-Analyse der 3,3 ML Fe-Schicht verwendet wurde. Das Ergebnis des Vergleichs der experimentellen Daten mit dem Modell von Lin et al. ist in Abb. 4.10 dargestellt. Bei diesem Vergleich ergibt sich ein R_p -Faktor von 0,666. Dies ist ein sehr hoher Wert und bedeutet, wie auch in Abb. 4.10 sichtbar, daß das Modell von Lin et al. [64] die experimentellen Daten für die Schicht von 3,3 ML nicht beschreibt. Insbesondere die Positionen der Maxima beider Kurven weisen eine deutliche Diskrepanz auf.

Die Diskrepanz in der Beschreibung ist mit der prinzipiellen Schwäche einer kinematischen LEED I(V)-Analyse, keine eindeutige Strukturaussage treffen zu können, zu begründen. Auch für eine volldynamische Analyse ist ein hinreichend großer Datensatz erforderlich. Die erforderliche Größe ist eine Funktion der Komplexität der zu bestimmenden Struktur. Die für die Analyse relevante Größe des Datensatzes ergibt sich durch den Energieüberlapp zwischen Modell und Experiment [24].

Die bisherigen Betrachtungen haben gezeigt, daß das Strukturmodell der kinematischen LEED- Studien für dünne Filme ungeeignet ist. Dieses Modell ist von einer kfz- Struktur ausgegangen. Außerdem hatten wir gesehen, daß die Ergebnisse für die dicken Fe- Schichten einer krz- Struktur entsprechen.

Die dünnen Filme hingegen sind tetragonal verzerrt. Wie weiter oben schon beschrieben, kann durch eine Analyse der tetragonalen Verzerrung mit Hilfe der Elastischen Theorie bestimmt werden, ob es sich bei der Grundstruktur um eine krz- oder eine kfz- Struktur handelt. Eine solche Analyse kann mit Formel 2.1.2.5 im Abschnitt 2.1 durchgeführt werden. Dazu ist es allerdings erforderlich, sowohl die Strukturen der in Frage

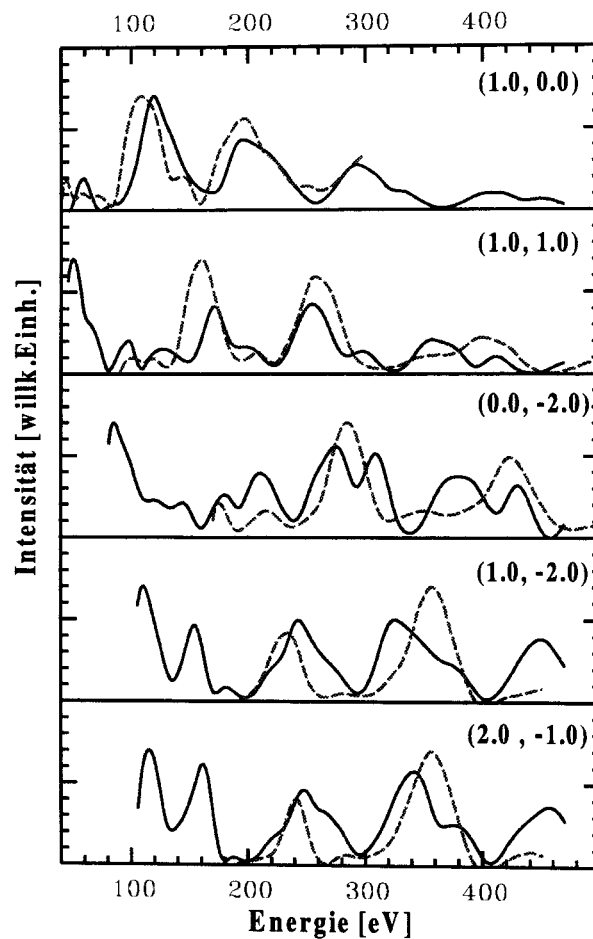


Abbildung 4.10: Der Vergleich des von Lin et al. [64] vorgeschlagenen Modells mit dem vollständigen experimentellen Datensatz zeigt, daß weder die Positionen der Peaks noch die Kurvenformen besonders gut zueinander passen und damit dieses Modell das Experiment nicht beschreibt.

kommenen Grundzustände als auch ihre elastischen Eigenschaften zu kennen. Aus den Untersuchungen zu Fe auf Cu(100) sind drei verschiedene Strukturen bekannt. Zwei dieser Strukturen haben eine kfz- Struktur. Eine dieser Strukturen ist ferromagnetisch und die andere ist antiferromagnetisch. Die dritte Struktur ist eine ferromagnetische krz- Struktur. Aus verschiedenen Untersuchungen sind die Grundzustände dieser verschiedenen Phasen bekannt. Die Strukturen und die dazugehörigen elastischen Konstanten sind in Tab. 4.2 dargestellt.

Das Modell der epitaktischen Linien (Abschnitt 2.1) erlaubt es, die elastischen Ver-

spannungen der verschiedenen Phasen zu simulieren. Um dieses Modell anwenden zu können, ist es allerdings notwendig, daß die elastischen Eigenschaften des Films unabhängig von der Filmdicke sind. Dazu ist es erforderlich, daß der Misfit klein ist und daß die elastischen Eigenschaften der Filme denen des Volumens entsprechen. Diese Bedingungen sind in diesem Fall nur bedingt erfüllt, da der Misfit zwischen den verschiedenen Grundzustandsstrukturen und dem Cu_3Au Substrat mit 3,1 bis 7,6 % relativ groß ist. Es ist daher notwendig, eine solche Analyse der epitaktischen Linie für dieses System mit der gebotenen Zurückhaltung zu vollziehen.

Das Ergebnis der Analyse ist in der Abb. 4.11 dargestellt. Dabei zeigt sich, daß die Ergebnisse der Strukturanalyse der Fe-Filme mit den Schichtdicken 3,3 ML, 4,8 ML, 18,7 ML und 53 ML sehr gut mit der epitaktischen Linie für krz Fe übereinstimmen. Die epitaktische Linie für das antiferromagnetische kFz Fe darf für die genaue Analyse der Struktur nicht berücksichtigt werden. Aus den magnetischen Messungen [64, 66] ist bekannt, daß die Fe-Filme auf Cu_3Au vollständig ferromagnetisch magnetisiert sind. Ohne die zusätzlich magnetische Information wäre es aufgrund des großen Fehlers für die Bestimmung von a_p und d_b allerdings schwer diese Struktur für die dünnen Fe-Schichten auszuschließen. Mit der epitaktischen Linie der ferromagnetischen kFz- Fe-Phase gibt es allerdings keine Übereinstimmung. Als Fazit ergibt sich, daß die dünnen Fe-Filme eine tetragonal verzerrte krz- Struktur haben. Eine kFz- Struktur kann eindeutig ausgeschlossen werden.

In die Abb. 4.11 wurde außerdem noch einmal der Datenpunkt für das Modell von Lin et al. eingetragen (Dreieck). Es zeigt sich für dieses Modell keinerlei Übereinstimmung mit den epitaktischen Linien der drei Grundzustände. Außerdem würde dem Modell eine starke Zunahme des Volumens entsprechen. Aus dieser Volumenzunahme würde sich ebenfalls eine starke Zunahme der elastischen Energie ergeben. Dieses könnte nur dann verstanden werden, wenn es, entsprechend dem Modell der Minimierung der Gesamt-Freien-Energie, Beiträge zur Freien Energie (Abschnitt 2.4) geben würde, die durch diese Struktur gegenüber einer Struktur, die sich von der krz Phase ableitet, verkleinert würden. Zu einer solchen Betrachtung ist es erforderlich, die verschiedenen Beiträge zur Freien Energie bzw. die verschiedenen Differenzen der Beiträge zur Freien Energie auf Cu_3Au im Vergleich zum Grundzustand bzw. zu Fe auf $\text{Cu}(100)$ zu quantifizieren. Eine solche Betrachtung wird weiter unten für einen Vergleich der beiden Strukturvorschläge durchgeführt.

Bisher wurden nur die Interlagenabstände für die Volumenlagen betrachtet. Um

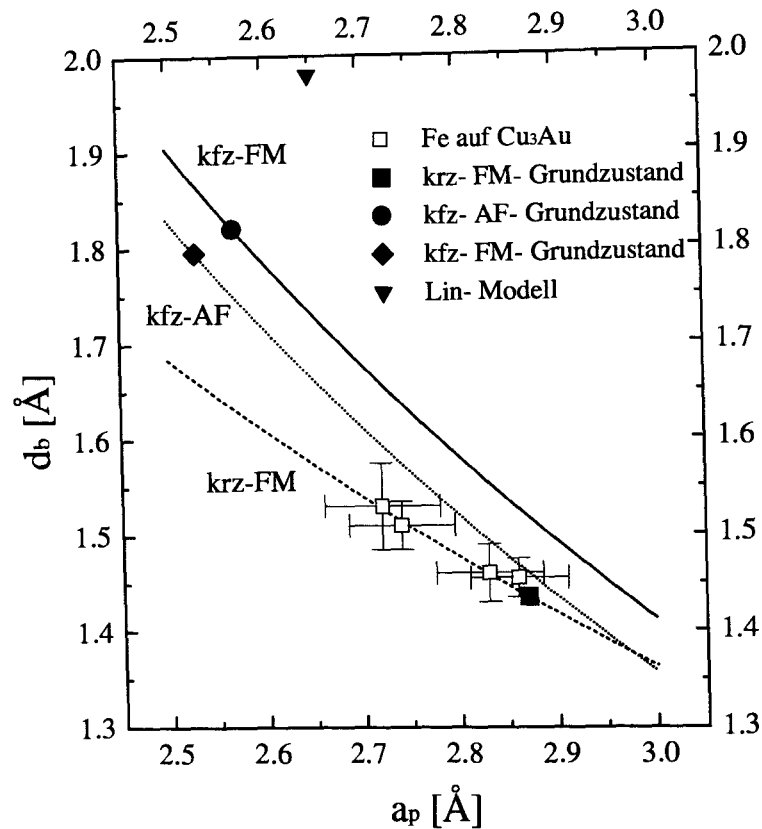


Abbildung 4.11: Epitaktische Linien von Fe im Vergleich mit den experimentellen Daten für Fe/Cu₃Au. Die Linien zeigen für die verschiedenen Fe-Strukturen die epitaktischen Linien, die sich aus der Formel 2.1.2.5 ergeben. Das Dreieck ergibt sich aus dem Vorschlag von Lin et al. [64] für einen 5,5 ML Fe-Film, der bei tiefen Temperaturen gewachsen wurde. Es zeigt keinerlei Übereinstimmung mit den epitaktischen Linien. Die vier offenen Quadrate stehen für die Studien, die in dieser Arbeit vorgestellt wurden. Sie stimmen sehr gut mit der epitaktischen Linie von krz-FM-Fe überein.

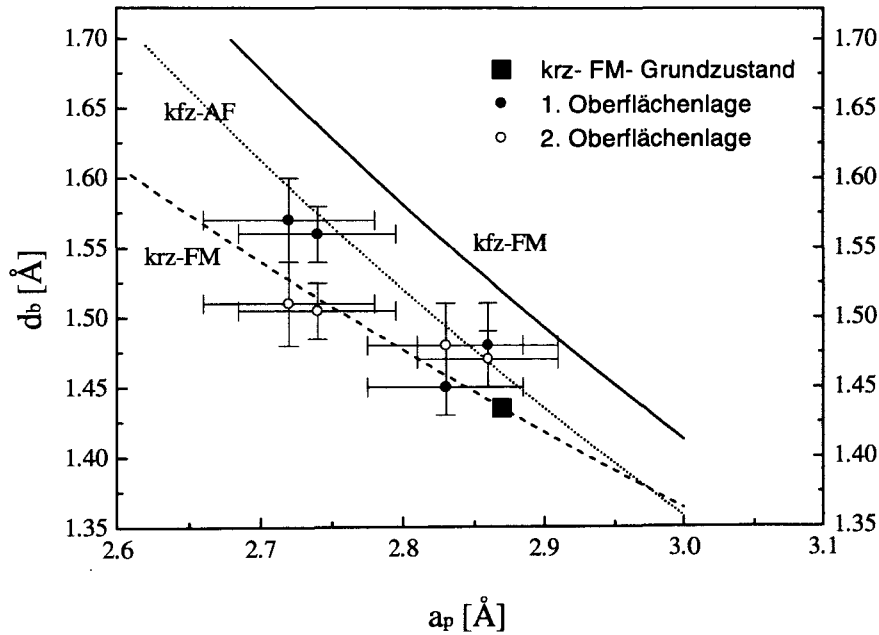


Abbildung 4.12: Vergleich der epitaktischen Linien von Fe mit den Strukturen der Oberflächenlagen. Auch die Struktur der Oberflächen wird durch die epitaktische Linie von krz- FM- Fe gut beschrieben. Das d_b der obersten Lage ist gegenüber der Volumenlage expandiert.

ein vollständiges Bild über die Strukturen der verschiedenen Schichtdicken zu erhalten, müssen noch die Oberflächenlagen betrachtet werden. Die Werte für die beiden Oberflächenlagen der vier Schichten sind in Abb. 4.12 in einem d_b - a_p - Diagramm dargestellt. Hierbei zeigt sich, daß die Werte für die Zwischenlagenabstände nicht mehr so gut mit der epitaktischen Linie der krz Struktur übereinstimmen. Für die dickeren Fe-Filme, d.h. für den 18,7 ML und den 53 ML Film gibt es eine leichte Tendenz zu größeren Zwischenlagenabständen im Vergleich zur Volumenlage des Modells. Allerdings ist diese Tendenz nicht ganz einheitlich, da die oberste Lage des 18,7 ML dicken Films im Vergleich zur Volumenlage einen kleineren Zwischenlagenabstand hat. Für die dünnen Fe-Filme ist d_{12} deutlich gegenüber d_b vergrößert, wohingegen d_{23} eher etwas kleiner ist. Allerdings unterscheiden sich die Zwischenlagenabstände der Oberflächenlagen in allen Fällen deutlich von der epitaktischen Linie der ferromagnetischen

kfz- Struktur.

Die Oberflächenlagen haben also ebenfalls keine kfz- Struktur, sondern nur eine etwas stärker tetragonal verzerrte krz- Struktur. Sie haben gegenüber den Volumenlagen einen leicht erhöhten Interlagenabstand. Dieses findet man auch für Fe auf Cu(001). Die Erhöhung des Interlagenabstandes an der Oberfläche ergibt sich aus dem Einfluß des Oberflächenbeitrags der Freien Energie.

Nachdem die Strukturen der Fe- Filme nun identifiziert sind, muß noch die Frage geklärt werden, ob diese Struktur durch eine Betrachtung der verschiedenen Beiträge zur Freien Energie erklärt werden kann.

Eine Betrachtung der verschiedenen Komponenten zur Freien Energie muß erklären, warum die krz- Fe-Phase energetisch günstiger ist als die kfz-Phase und warum die krz-Struktur auch im Bereich weniger Atomlagen nicht pseudomorph aufwächst.

Bei einer solchen Analyse sind die verschiedenen Energiebeiträge zu berücksichtigen, die in Abschnitt 2.4 betrachtet worden sind. Die Beiträge wurden dabei in zwei verschiedene Gruppen eingeteilt. Die erste Gruppe enthält die Volumenterme. Dies sind die Beiträge durch die Kristallstruktur und durch den magnetischen Zustand. Die zweite Gruppe beinhaltet die Beiträge, die direkt mit den Eigenschaften und dem Wachstum dünner Filme im Zusammenhang stehen. Dies sind der Grenz-, der Oberflächenbeitrag und der Beitrag der sich aus der Spannung des Films durch den Misfit gegenüber dem Substrat ergibt. Um den Einfluß der verschiedenen Beiträge auf die Struktur zu verdeutlichen, bietet es sich an, sie einzeln zu diskutieren.

Als erstes wurden die Dünnschicht- Beiträge behandelt.

Für den Oberflächenbeitrag zur Freien Energie hat sich anhand der Ergebnisse für Fe auf Cu(001) gezeigt, daß dieser Beitrag die ferromagnetische kfz- Phase gegenüber der antiferromagnetischen kfz- Phase stabilisiert. Dies bedeutet, daß durch den Oberflächenenergiebeitrag für die oberste Atomlage ein größeres Volumen stabilisiert wird. Wie den Werten der Tabelle 4.1 zu entnehmen und aus der Abbildung 4.13 ersichtlich ist, trifft dies auch für die beiden dünnen Fe-Schichten zu. Das atomare Volumen in der ersten Oberflächenlage ist deutlich größer als in den darunterliegenden Lagen. Es ist allerdings nicht klar, ob und inwieweit der Oberflächenbeitrag die ferromagnetische kfz- Phase gegenüber der krz Phase bevorzugt.

Auch von dem Grenzflächenbeitrag ist unbekannt, ob und wie stark er sich für die kfz- und die krz- Fe- Struktur unterscheidet. Es ist allerdings bekannt, daß die zweite kfz Phase in dem System Fe auf Cu(100) thermodynamisch instabil ist. Dies haben

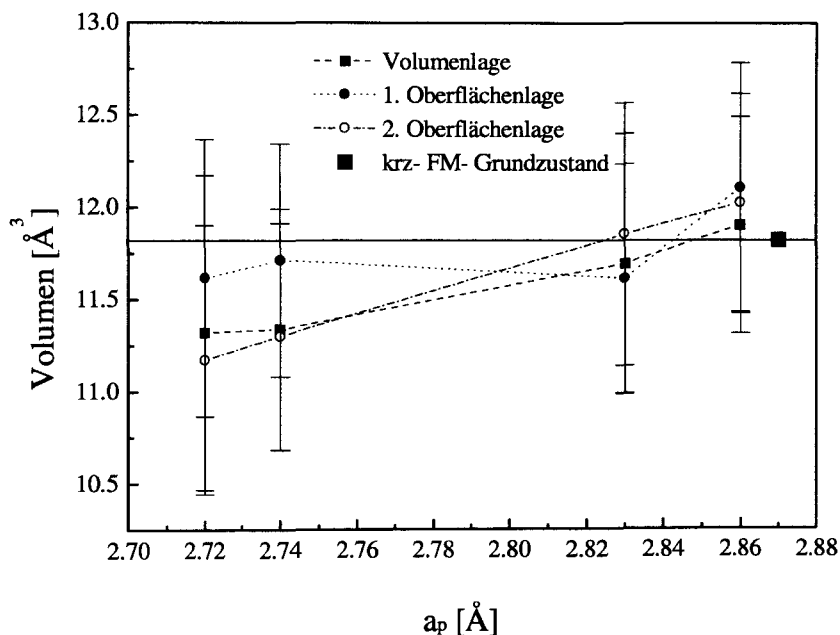


Abbildung 4.13: Vergleich des atomaren Volumens mit dem nächsten Nachbarabstand. Das Volumen der krz Fe-Volumenstruktur dient als Orientierungspunkt (großes Quadrat). Das atomare Volumen der obersten Oberflächenlage ist ungefähr konstant, das der anderen Lagen wächst mit steigendem a_p .

verschiedene Studien gezeigt [27, 29]. Die zweite kfz- Fe Struktur auf Cu(001) ist nur kinematisch stabilisiert.

Der dritte Dünnschicht- Beitrag, der Verspannungsenergieterm, ergibt sich durch die Verspannung der Grundzustände durch das Wachstum auf dem Substrat Cu_3Au . Die Energien lassen sich für die verschiedenen Modelle auf der Basis der Elastischen Theorie anhand von Formel 2.1.2.4 berechnen. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Abb. 4.14 dargestellt, wobei die Parameter aus Tab. 4.2 zur Berechnung der Energien verwendet wurden. Dabei zeigt sich, daß z.B. das Modell von Lin et al. [64] bzgl. der Verspannungsenergie sehr ungünstig ist. Für dieses Modell müßte gegenüber dem Grundzustand des ferromagnetischen kfz- Fe zusätzliche 350 meV aufgebracht werden. Dies ist umso auffälliger, da die zusätzliche Spannungsenergie für einen kfz- Fe-Film

durch eine elastische Spannung durch das Cu_3Au Substrat nur ca. 6 meV betragen sollte. Diese Überlegung zeigt wiederum, wie wenig plausibel das Modell von Lin ist.

Bei der Betrachtung der Kurven, die die Verspannungsenergie für die kfz- und die krz- Struktur in Abhängigkeit von a_p darstellen, zeigt sich, daß die kfz Struktur bis zu einem a_p von ca. 2,77 Å energetisch günstiger ist. Bei einem a_p von 2,72 Å beträgt die Differenz ca. 50,5 meV zugunsten der kfz- Struktur und bei einem a_p von ca. 2,65 Å sogar 154 meV. Bei einer separaten Betrachtung der elastischen Energie wäre also die kfz- Struktur für das Wachstum von Fe auf Cu_3Au günstiger.

An dieser Stelle sei als Bemerkung angefügt, daß sich für den im vorherigen Abschnitt untersuchten 3,3 ML dicken Film ein anderes Bild ergibt. Wenn man die dort bestimmten strukturellen Parameter und die elastischen Konstanten aus Tab. 4.2 berücksichtigt, ergibt sich ein Energievorteil von ca. 70 zu 91 meV zugunsten einer Interpretation des Modells als eine verspannte krz- Struktur.

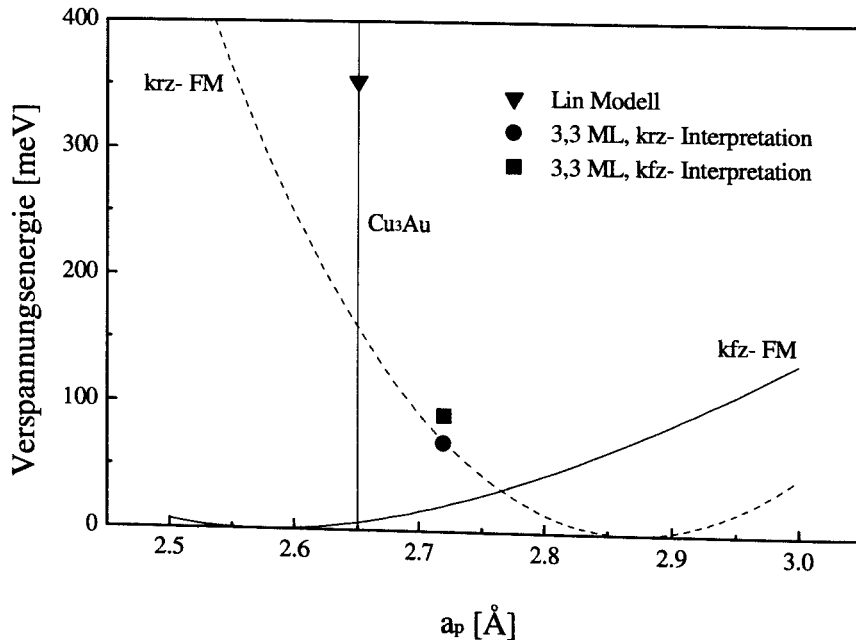


Abbildung 4.14: Elastische Energie in Abhängigkeit von a_p . Die kfz- Struktur ist bis 2,77 Å energetisch günstiger.

Von den drei Dünnschichtbeiträgen ist also nur der Term quantifizierbar, der die elastische Energie beschreibt. Dieser führt zu einer Bevorzugung der kfz- Struktur.

Allerdings müssen auch die Volumenbeiträge zur Freien Energie betrachtet werden. Hierzu gibt es verschiedene theoretische Studien, die eine Kombination der Kristallstruktur und des magnetischen Zustandes behandeln. Eine dieser Untersuchungen ist die von Asada und Terakura [14]. Nach dieser Studie gibt es einen Energievorteil zugunsten des Grundzustandes der ferromagnetischen krz- Fe-Phase gegenüber der ferromagnetischen kfz- Phase von 207 meV.

Um zu bestimmen, für welche Struktur die gesamte Freie Energie minimal ist, muß man die verschiedenen Energiebeiträge summieren. Wenn man sowohl die Volumenbeiträge nach Asada und Terakura als auch den Beitrag durch die Verspannungsenergie summiert, würde sich bis zu einem a_p von ca. 2,62 Å ein energetischer Vorteil für die kfz- Phase ergeben. Für größere a_p , also auch für Cu₃Au, wäre eine krz- Struktur stabil. Diese Überlegung macht plausibel, warum Fe auf Cu₃Au in einer krz- Phase aufwächst. Für eine exakte quantitative Analyse sind allerdings die Oberflächen- und Grenzflächenbeiträge zu berücksichtigen. Auch müßte man in Betracht ziehen, daß die Verspannungsenergie z.B. durch Versetzungen abgebaut werden kann.

4.2.3 Fazit

Ziel der in diesem Kapitel dargestellten Arbeiten war es, die Struktur von dünnen Fe-Filmen auf Cu₃Au zu ermitteln. Wobei hier insbesondere das Ziel war zu bestimmen, ob die Filme in einer kfz- oder in einer krz- Struktur aufwachsen. Dazu wurde anhand von volldynamischen LEED I(V) Analysen für vier verschiedene Schichtdicken die Struktur bestimmt. Zurückgegriffen wurde dabei auf Untersuchungen des Wachstums und Magnetismus von Fe auf Cu₃Au(001) von Feldmann et al. [16, 66]. Die LEED I(V)- Analysen zeigen (Tab. 4.1), daß die Struktur aller vier Schichtdicken (3,3 ML, 4,8 ML, 18 ML und 53 ML) nicht pseudomorph ist. Die beiden dünnen Fe- Filme haben eine tetragonal verzerrte krz- Struktur und die beiden dickeren Filme eine krz- Struktur, die der Struktur von Volumen Fe entspricht. Anschließend wurden die ermittelten Strukturen mit dem sich aus der Theorie der elastischen Verformung ergebenden Modell der epitaktischen Linie verglichen. Anhand dieses Modells wurden die Strukturen aller vier Schichtdicken als krz- Strukturen mit unterschiedlicher Verspannung identifiziert. Außerdem wurde eine Analyse der verschiedenen Beiträge zur Freien

Energie durchgeführt. Dabei ergeben sich als wesentliche, quantifizierbare Beiträge die Volumen- und die Verspannungsenergiebeiträge. Der Verspannungsenergiebeitrag ist für die ferromagnetische kfz- Struktur bis zu einem a_p von $2,77 \text{ \AA}$ kleiner und damit energetisch günstiger als für die krz- Struktur. Die Volumenbeiträge sind allerdings günstiger für die krz- Struktur. Wenn man beide Beiträge addiert, zeigt sich, daß die kfz- Struktur bis zu einem a_p von $2,62 \text{ \AA}$ thermodynamisch günstiger ist als die krz- Struktur.

Zusammenfassend konnte die Struktur von dünnen Fe-Filmen auf Cu_3Au eindeutig als eine tetragonal verzernte krz- Struktur identifiziert werden. Weiterhin konnte anhand des im Abschnitt 2.4 vorgestellten erweiterten Modells geklärt werden, wieso diese Struktur bevorzugt wird, obwohl die kfz- Struktur stabiler sein sollte, wenn man nur die Verspannungsenergie alleine betrachtet. Damit konnte gezeigt werden, daß das in Abschnitt 2.4 vorgestellte Modell die Struktur dünner Fe- Filme erklärt.

Kapitel 5

Struktur von dünnen Manganfilmen auf Cu_3Au

Mangan zeigt im Vergleich zu den anderen 3d-Übergangsmetallen wie z.B. Ni, Co, Cr und Fe ungewöhnliche strukturelle Eigenschaften. Es bildet unter Normalbedingungen, d.h. Raumtemperatur und Atmosphärendruck, eine kubische Struktur (die sogenannte α -Phase) mit 58 Atomen pro Einheitszelle [69]. Die α -Phase ist damit weitaus komplizierter als die hexagonalen-, krz- oder kfz-Strukturen, die für die anderen 3d-Metalle den Grundzustand bilden. Erst bei hohen Temperaturen von 1368 bis 1406 K ist eine kfz- und von 1406 bis 1517 K eine krz-Struktur stabil. Aufgrund dieses Verhaltens im Volumen ist es besonders interessant, das Verhalten dünner Mn-Schichten zu untersuchen.

Frühere experimentelle Arbeiten zeigen, daß sowohl hexagonale [70], als auch tetragonal verzernte krz- [71–74] und kfz- Mn-Strukturen [75, 76] stabilisiert werden können. Studien an dem System Mn/Cu(001) haben gezeigt, daß Mn bei diesem System in einer quasihexagonalen Struktur aufwächst. Allerdings sollte es nach einer Abschätzung von Feldmann [16] möglich sein, auf Cu_3Au eine nur schwach tetragonal verzernte kfz-Modifikation des Mn aufzuwachsen. Der Übergang zwischen dem Wachstum der quasihexagonalen und der kfz-Struktur sollte für einen nächsten Nachbarabstand (a_p) zwischen dem von Cu und Cu_3Au vonstatten gehen. Auch ist die kfz-Modifikation eventuell ferromagnetisch. Die Abschätzung von Feldmann basiert auf den Ergebnissen der Ref. [77] und einer Extrapolation des elastischen Verhaltens von Mn.

Durch die Bestimmung der Struktur und der magnetischen Eigenschaften von Mn auf

Cu_3Au ergibt sich also die Möglichkeit zu prüfen, inwieweit das erweiterte thermodynamische Konzept in der Lage ist, die Eigenschaften von dünnen magnetischen Filmen im Übergangsbereich zu beschreiben.

5.1 Wachstum und Morphologie

Über die Charakterisierung des Wachstums und der Morphologie wird schon von Feldmann [16] und Schirmer [78] berichtet. Daher werden in diesem Abschnitt nur die Ergebnisse der Untersuchungen referiert.

Es wurden Auger-Untersuchungen durchgeführt, um das Diffusionsverhalten von Cu und Au aus dem Substrat in den Mn-Film zu charakterisieren. Dabei zeigt sich, daß bei Temperaturen, die nur wenige Grad über Raumtemperatur liegen, Cu und Au bei Schichtdicken bis 3 ML an die Oberfläche diffundieren. Für Schichtdicken ab 5 ML steigt diese Diffusionstemperatur bis auf 453 K an [78]. MEED- Untersuchungen zeigen, daß die Mangan-Filme bei der Deposition bei Raumtemperatur bis mindestens zu Schichtdicken von 20 ML lagenweises Wachstum zeigen. Für Depositionstemperaturen unterhalb von Raumtemperatur wird dieses Verhalten nur für einige wenige Monolagen gefunden [16, 78]. Um eine qualitative Information über die Struktur der Mn- Filme zu erhalten, wurden LEED-Bilder für verschiedene Mn- Schichtdicken ausgewertet. Die LEED-Bilder (siehe Abb. 5.1) zeigen, daß Mn pseudomorph auf Cu_3Au aufwächst. Weiterhin gibt es Hinweise auf eine Änderung der Struktur im Schichtdickenbereich um 6 bis 8 ML Mn auf Cu_3Au . In diesem Zwischenbereich sinkt die mittlere Intensität ab. Dieses Verhalten kann mit einer verminderten langreichweitigen Ordnung erklärt werden [16].

5.2 Struktur

Die Struktur wurde zuerst qualitativ mit LEED- und MEED- Studien und anschließend mit Hilfe von quantitativen LEED I(V)- Studien charakterisiert. Hierbei wurde auf experimentelle Daten von B. Feldmann zurückgegriffen [16].

Aus den MEED- Untersuchungen und den LEED- Bildern (siehe vorheriger Abschnitt und [16]) ergab sich als qualitatives Ergebnis, daß sich die Struktur im Schichtdicken-

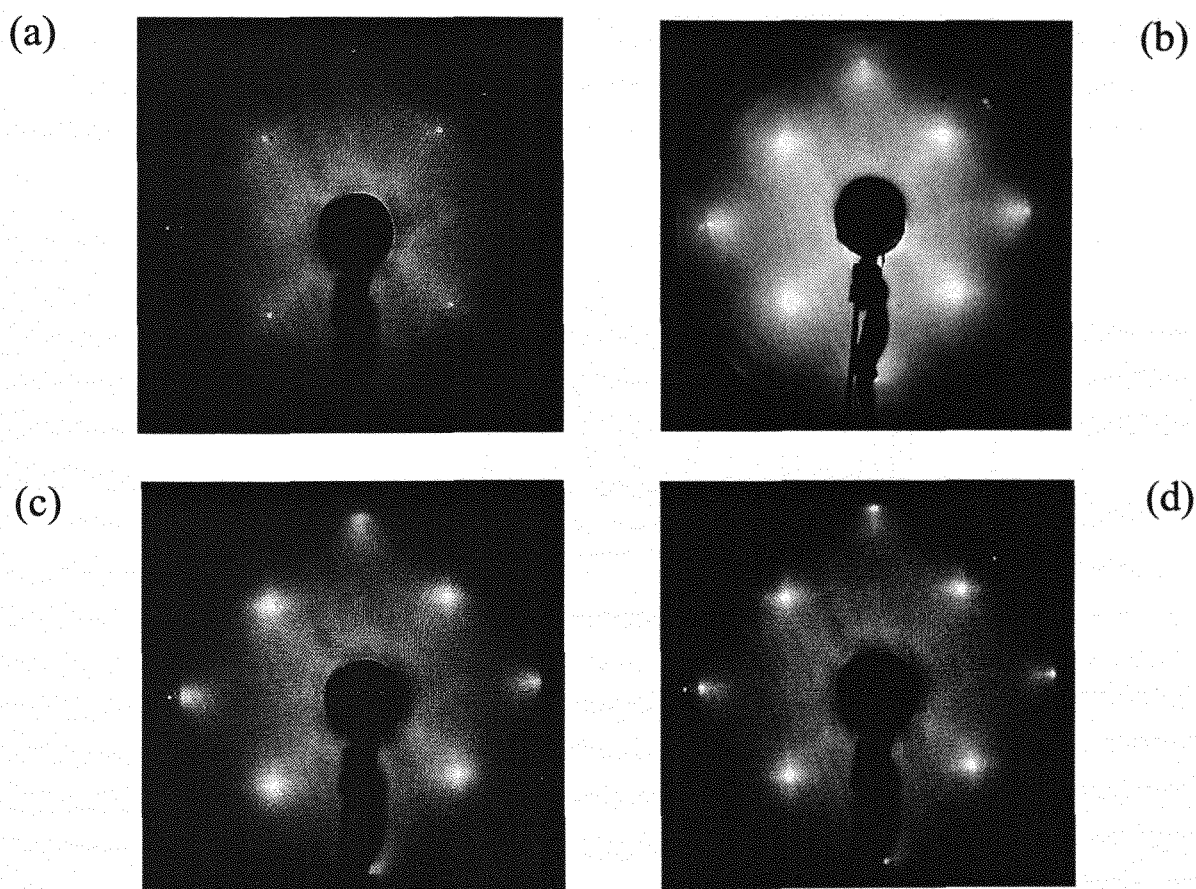


Abbildung 5.1: LEED- Bilder der Mn- Filme auf Cu_3Au in Abhängigkeit der Schichtdicke. Die Mn- Filme wurden bei einer Temperatur von 173 K aufgewachsen und danach 10 min bei 300 K getempert [16]. (a) 2,6 ML, $E = 112,5$ eV (b) 6,7 ML, $E = 112,5$ eV (c) 7,9 ML, $E = 112,5$ eV (d) 16,1 ML, $E = 117,2$ eV.

bereich zwischen 6 und 8 ML ändert. Um diesen Eindruck durch LEED $I(V)$ - Daten zu verifizieren, wurde eine Serie von $I(V)$ - Kurven des (1,1)- Reflexes bei verschiedenen Schichtdicken aufgenommen. Wie in der Abb. 5.2 anhand der Positionen der Maxima erkennbar ist, zeigt Mn in Abhängigkeit von der Schichtdicke in der Tat zwei strukturelle Phasen. So findet man z.B. für den 5,2 ML dicken Film charakteristische Maxima bei 266 und 366 eV. Vergleichbare Maxima für den 16 ML Film liegen bei 305 und 431 eV. Die $I(V)$ - Kurven des 7,9 ML dicken Mn- Film zeigen Maxima, die charakteristisch für beide Strukturen sind. So findet man für diesen Film im Energiebereich zwischen 250 und 450 eV zwei Doppelmaxima (274 und 305 eV bzw. 395 und 431

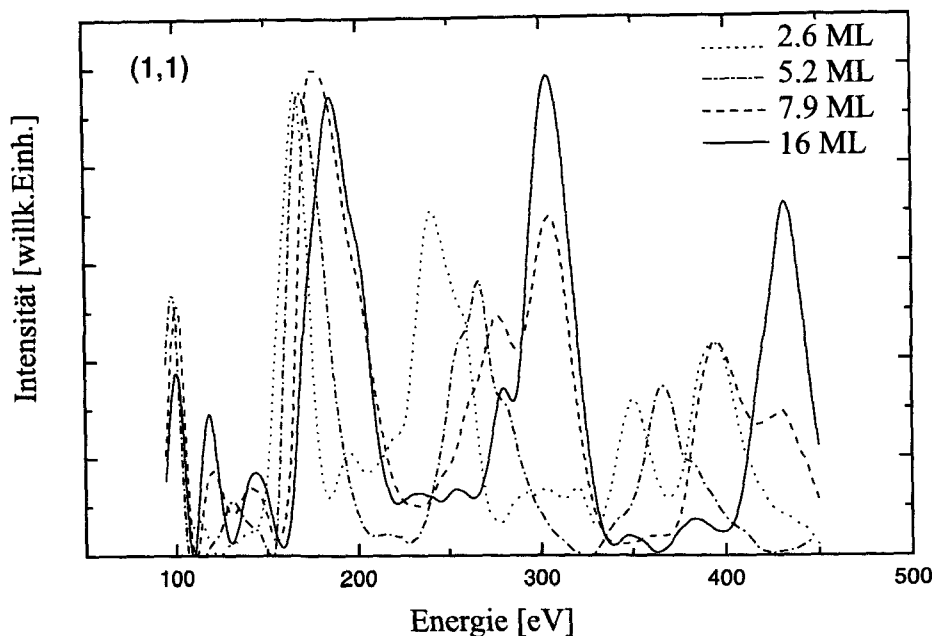


Abbildung 5.2: LEED I(V)- Kurven für verschiedene Mn-Schichtdicken. Die Filme wurden bei 173 K aufgewachsen und anschließend für 10 min bei 300 K getempert. Die Positionen der Intensitätsmaxima ändern sich mit der Schichtdicke. Der 2,6 ML Film zeigt noch einen starken Einfluß des Substrats. Die 5,2 und 16 ML Filme unterscheiden sich deutlich [16].

eV). Es handelt sich bei dem 7,9 ML dicken Film also um eine Mischung von zwei verschiedenen Strukturen. Damit wird das Ergebnis bestätigt, daß aus den MEED-Kurven und LEED- Bildern gewonnen wurde. Es gibt zwei verschiedene Mn- Phasen, wobei die Übergangsschichtdicke bei einer Mn- Schichtdicke von ca. 8 ML liegt.

Um einen vollständigen Überblick über die Struktur von Mn auf Cu_3Au zu gewinnen, wurde für jeweils eine Mn- Schicht aus beiden Phasen ein LEED I(V)- Datensatz aufgenommen und analysiert. Dazu wurden Schichten mit einer Mn- Filmdicke von 5,2 und 16 ML gewählt. Die Rechnungen zu dem 16 ML Film wurden von Yves Gauthier (CNRS Grenoble) durchgeführt und werden in Ref. [78] veröffentlicht. Daher werden hier die Ergebnisse nur referiert, bzw. zum Vergleich mit dem 5,2 ML Film verwendet. Bei den im nächsten Abschnitt vorgestellten Rechnungen handelt es sich also nur um die Rechnungen zur Bestimmung der Struktur des 5,2 ML dicken Mn- Films. Beide Studien ergänzen sich aber, so daß in der anschließenden Diskussion beide Filme behandelt werden. Die beiden untersuchten Mn- Filme wurden gleich präpariert und bei

einer Temperatur von 173 K hergestellt. Nach der Herstellung sind die Filme für 10 min bei 300 K getempert worden, um die Rauigkeit zu senken und die Ordnung zu erhöhen. Für die Messung der LEED $I(V)$ - Kurven wurden sie auf 140 K abgekühlt.

5.2.1 Rechnungen

Für dünne Filme ist eine präzise Bestimmung der Oberflächenstruktur komplizierter als für dickere Filme. Bei dünnen Filmen muß sowohl die Struktur der Grenzfläche zwischen Substrat und Film als auch eine mögliche Interdiffusion an der Grenzfläche berücksichtigt werden.

Günstiger wird die Situation aber dadurch, daß die verschiedenen Lagen unterschiedlich stark zu der Streuamplitude beitragen. Die ersten drei bis vier ML tragen hauptsächlich zur Streuamplitude bei. Die darunterliegenden Lagen haben allerdings auch einen Anteil an der Streuamplitude, der nicht zu vernachlässigen ist. Dieser Anteil beeinflusst die Güte und die Aussagekraft der Studie. Um den Einfluß der Grenzfläche möglichst gering zu halten, wurde als Schichtdicke im Bereich der ersten Phase 5,2 ML gewählt. Bei dieser Schichtdicke sollte der Einfluß der Grenzfläche bei kleineren Energien (bis ca. 300 eV) klein sein. Weiterhin wurde das Modell, daß sich aus der Bestimmung der Struktur des 16 ML Mn-Filmes ergeben hat, als Startmodell verwendet (Tab. 5.1). Dieses wurde gewählt, um den Rechenaufwand zu minimieren. Bei diesem Modell wird der Mn-Film durch zwei Oberflächenlagen und eine Volumenlage beschrieben, d.h. durch zwei variierbare Interlagenabstände für die Oberflächenlagen und einen für die Volumenlage. Im Laufe der Untersuchungen zeigte sich allerdings, daß ein Modell, das drei Oberflächenlagen und eine Volumenlagen verwendet, das Experiment besser beschreibt.

Die aufgrund der Meßgeometrie vorhandene Verkipfung (Tilt) muß berücksichtigt werden. Dieser wurde schon bei der Analyse der $I(V)$ - Kurven des 16 ML- Films zu $1,2^\circ$ bestimmt.

Bei den Rechnungen wurden in einem ersten Schritt die verschiedenen Parameter im Hinblick auf ein minimales R_p mit diesem Modell optimiert. Dabei ergaben sich die in Tabelle 5.1 gezeigten Parameter für ein minimales R_p von 0,215. Die Güte dieses Modells zeigt sich bei einem visuellen Vergleich der experimentellen und theoretischen $I(V)$ - Kurven (Abb. 5.3). Man erkennt bei diesem Vergleich, daß beide Kurven eine gute Übereinstimmung sowohl in den Positionen der Maxima als auch in der Höhe der

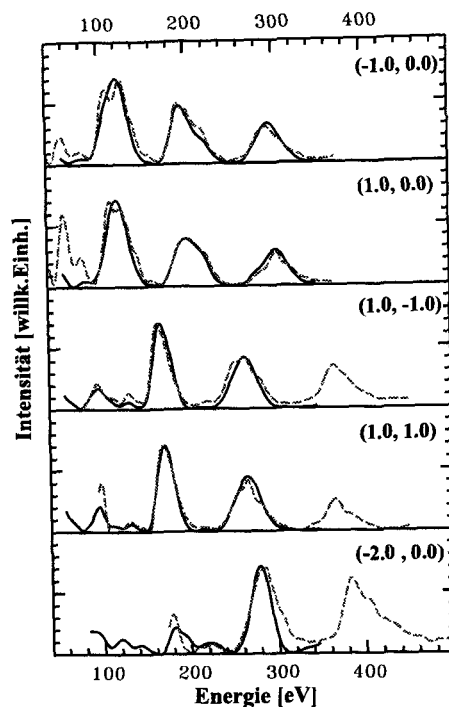


Abbildung 5.3: Die experimentellen LEED $I(V)$ -Kurven (gestrichelte Linien) für den 5,2 ML- Film im Vergleich mit den theoretischen $I(V)$ -Kurven (durchgezogene Linien). Man erkennt, daß die Theorie sehr gut das Experiment beschreibt. Größere Differenzen treten nur beim $(-2,0)$ - Reflex auf.

Kurven zeigen. Dieses steht im Einklang mit dem niedrigen Wert für R_p . Größere Differenzen gibt es nur bei größeren Energien für die Reflexe höherer Ordnung. Hier zeigt sich vermutlich der Einfluß der Grenzschicht stärker.

Für das minimale R_p liegt der nächste Nachbarabstand bei $2,67 \text{ \AA}$. Dieser Wert entspricht, wenn man die Unsicherheit bei der Bestimmung des a_p berücksichtigt, dem Wert für den 16 ML Film und dem Gitterparameter des Cu_3Au Substrats. Mn wächst also auch in diesem Schichtdickenbereich pseudomorph auf. Die Interlagenabstände des 5,2 ML- Films unterscheiden sich allerdings deutlich von denen des 16 ML- Films. Sie sind merklich gegenüber dem Gitterparameter des Cu_3Au - Substrats expandiert. In Tab. 5.1 sind die strukturellen Parameter den verschiedenen Werten für den 16 ML Film gegenübergestellt. Für die oberste Lage ist der Interlagenabstand für den 5,2 ML- Film ($d_{12} = 1,93 \text{ \AA}$) um ca. 2,7 % gegenüber dem 16 ML- Film expandiert. Für die

darunterliegenden Lagen nimmt der Interlagenabstand ($d_{23} = 1,91 \text{ \AA}$, $d_{34} = 1,92 \text{ \AA}$ und $d_b = 1,99 \text{ \AA}$) im Gegensatz zum 16 ML- Film nicht ab, sondern sogar zu. Dies zeigt, daß hier zwei verschiedene Strukturen vorliegen.

Der große Fehler in der Bestimmung von d_{34} und d_b erschwert allerdings für diese beiden Parameter eine genaue Aussage. Der Fehler steigt von Werten von $\pm 0,03 \text{ \AA}$ für d_{12} auf Werte von bis zu $\pm 0,1 \text{ \AA}$ für die Volumenlage an (Abb. 5.4). Diese größeren Unsicherheiten stellen allerdings nicht in Frage, daß es sich hier um zwei verschiedene Strukturen handelt.

In einem zweiten Schritt wurde auch noch die Zusammensetzung der einzelnen Schichten variiert, um einen eventuellen Einfluß der Diffusion zu beschreiben. Da in dem verwendeten Programm Lagen nur aus zwei verschiedenen Materialien zusammengesetzt werden können, mußte hierbei der Effekt von Cu und Au auf die verschiedenen Lagen getrennt untersucht werden. Dabei ergab sich die in Abb. 5.5 dargestellte Abhängigkeit des R_p - Faktors von der Zusammensetzung der verschiedenen Schichten. Man erkennt in der Abbildung sehr gut, daß es mit LEED schwer ist, Cu und Mn zu unterscheiden. So findet man für Cu, wie in Fig. 5.5 dargestellt, eine sehr schwache Zunahme des R_p - Faktors. Dieses führt dazu, daß man einige Prozent Cu in den verschiedenen Schichten nicht ausschließen kann. Mn und Au lassen sich aufgrund der deutlich verschiedenen atomaren Massen wesentlich besser unterscheiden. Daher kann

Tabelle 5.1: Die Tabelle zeigt einen Vergleich der Parameter für den 5,2 und den 16 ML dicken Mn-Film.

Parameter	5,2 ML	16 ML
R_p	0,215	0,156
$d_{12} [\text{\AA}]$	$1,93 \pm 0,025$	$1,880 \pm 0,025$
$d_{23} [\text{\AA}]$	$1,91 \pm 0,052$	$1,775 \pm 0,01$
$d_{34} [\text{\AA}]$	$1,92 \pm 0,08$	$1,77 \pm 0,01$
$d_b [\text{\AA}]$	$1,99 \pm 0,12$	$1,77 \pm 0,01$
$a_p [\text{\AA}]$	$2,67 \pm 0,06$	$2,64 \pm 0,015$
$\Theta_{D1} [\text{K}]$	150	215
$\Theta_{Db} [\text{K}]$	370	490
$\Delta E [\text{eV}]$	1430	2525

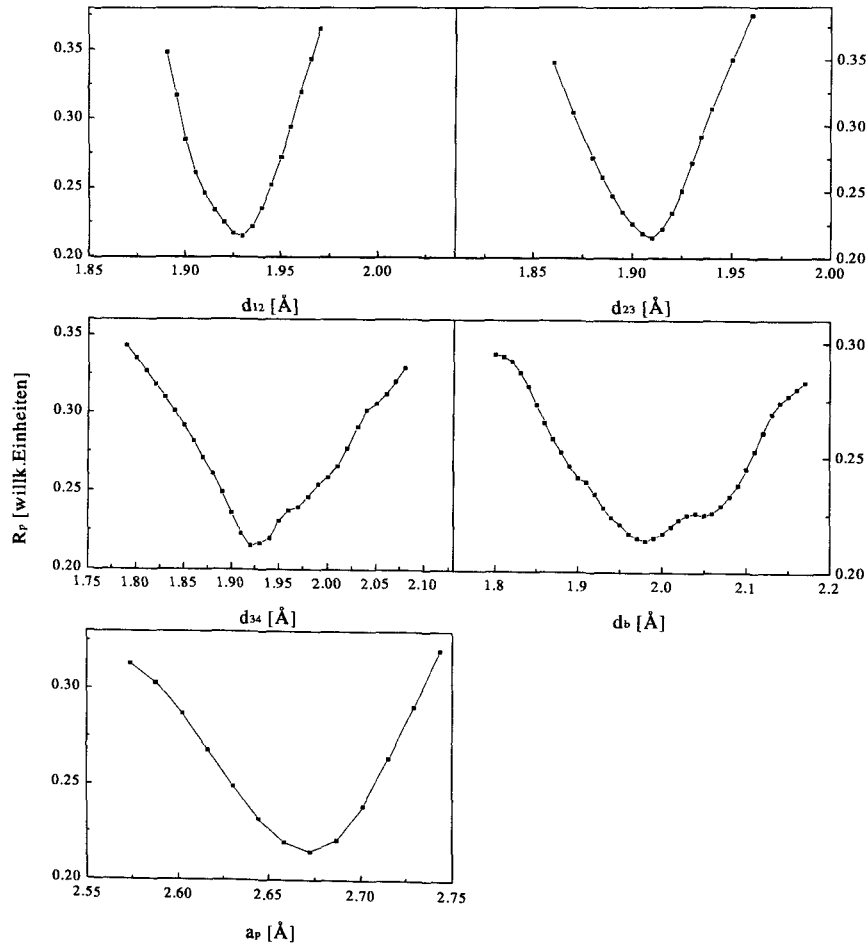


Abbildung 5.4: Einfluß der Variation der Strukturparameter auf R_p für den 5,2 ML Mn- Film. Die Variation von d_{12} , d_{23} und a_p führt zu einem deutlichen Minimum, d.h. die Parameter lassen sich gut bestimmen. Dies ist für d_{34} und d_b nicht der Fall. Hier zeigen sich die Grenzen des Modells.

man den Au- Anteil an der Zusammensetzung der verschiedenen Schichten wesentlich besser abgrenzen. Aber auch für Au ist nicht auszuschließen, daß sich einige wenige Prozent in den verschiedenen Lagen befinden. Beimengungen von Cu oder Au führen aber für keine der getesteten Fälle zu einem kleinerem R- Faktor. Der Einfluß auf die Analyse der strukturellen Eigenschaften ist also sehr klein. Man kann ihn daher für

die weitere Diskussion vernachlässigen.

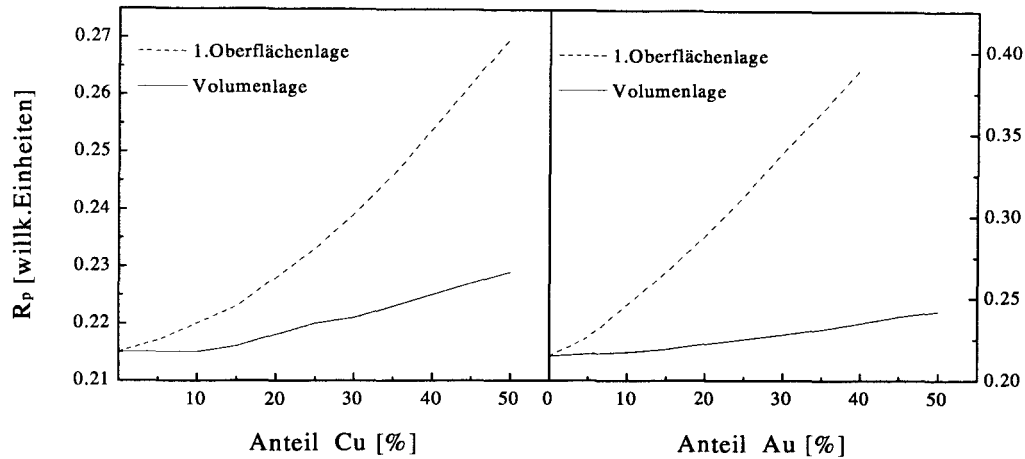


Abbildung 5.5: Einfluß von Cu- und Au- Beimengungen auf R_p . Cu läßt sich aufgrund der ähnlichen Streueigenschaften nur sehr schlecht vom Mn unterscheiden. Au- Beimengungen lassen sich deutlich besser ausschließen. Das Minimum befindet sich immer bei 0 % Beimengung. Allerdings lassen sich aufgrund des Fehlerbalkens einige Prozent Cu oder Au in den verschiedenen Lagen nicht ausschließen.

5.2.2 Einordnung und Diskussion

Im letzten Abschnitt wurden die strukturellen Parameter der 5,2 ML dicken Mn-Schicht bestimmt. Es bleibt allerdings zu klären, welcher Struktur (krz oder kfz) diese Parameter entsprechen. Das Ziel ist, Informationen über die strukturellen und magnetischen Eigenschaften von dünnen Mn-Schichten zu gewinnen. Auch bleibt zu klären, ob diese Eigenschaften anhand des erweiterten thermodynamischen Modells verstanden werden können. Dazu brauchen wir einen Überblick über die beiden strukturellen Phasen, die gefunden worden sind. Dieses ist nur unter Einbeziehung der Daten des 16 ML dicken Mn-Films möglich. Daher wird die Analyse der Struktur auch aufbauend auf den Rechnungen von Y. Gauthier zu dieser Schichtdicke vorgenommen [78].

Um das Modell aus Abschnitt 2.4 zu testen, braucht man sowohl Informationen über

die Struktur als auch die magnetische Ordnung, daher wird im Folgenden in zwei Schritten vorgegangen. Im ersten Teil wird versucht die Struktur zu klären. Mit Hilfe der Struktur und der magnetischen Untersuchungen, die von B. Feldmann vorgenommen worden sind [16], wird im zweiten Teil die magnetische Ordnung bestimmt.

Wie wir bereits im vorherigen Kapitel gesehen haben, ist es sinnvoll die tetragonale Verzerrung d.h. das c/a -Verhältnis zu betrachten, wenn die Gleichgewichtsstruktur bestimmt werden soll. Das c/a -Verhältnis für die erste Lage der dünnen Schicht ist mit ca. 1,46 größer als der Wert einer kfz-Struktur ($\sqrt{2} \approx 1,41$). Es fällt aber bis in die dritte Lage auf 1,45 ab, d.h. einem Wert, der nicht wesentlich näher an dem Wert für die kfz-Struktur ist. Für den 16 ML dicken Film ergibt sich ein weitaus deutlicherer Abfall des c/a -Verhältnisses von 1,42 für die oberste Lage auf 1,34. Die Volumenstruktur dieser Schichtdicke ist im Verhältnis zu einer kfz-Struktur parallel zur Oberflächennormale gestaucht. Beide Schichten sind also im unterschiedlichen Maße gegenüber einer kfz-Struktur tetragonal verzerrt.

Um dieses Verhalten quantitativ zu verstehen, ist es sinnvoll zuerst den Einfluß des Substrates auf die Struktur des Filmes, d.h. den Einfluß der Verspannungsenergie zu untersuchen. Die einfachste Möglichkeit ist sicherlich die im Abschnitt 2.1 beschriebene Elastische Theorie. So könnte man mit der Formel 2.1.2.5 ein aus der Elastischen Theorie zu erwartendes c/a -Verhältnis bestimmen. Dazu ist aber sowohl die Kenntnis der elastischen Konstanten von dünnen Mn-Filmen als auch der Gleichgewichtsstruktur von solchen Filmen notwendig. Für Mn ist beides nicht bekannt. Es gibt nur für das Poisson-Verhältnis von Mn eine indirekte Abschätzung durch eine LEED I(V)-Untersuchung von Kim et al. [74]. Weiterhin hat sich herausgestellt, daß die in Abschnitt 2.3 gezeigten Ergebnisse der Rechnungen für die totale Energie der verschiedenen Mn-Phasen aufgrund der Schwierigkeiten der verwendeten Methode (general gradient approximation (GGA)) mit Mangan problematisch sind [80].

Um einen Hinweis auf die Gleichgewichtsstruktur zu bekommen, ist es daher sinnvoll, die hier ermittelten Strukturdaten mit denen anderer Gruppen zu vergleichen. Zu einem solchen Vergleich betrachtet man nur solche Studien bei denen Mn auf einkristallinen Substraten mit einem ähnlichen Gitterparameter wie Cu_3Au aufgewachsen worden ist. Die Studien beinhalten Mn auf Ir(100) Ref. [76] (dabei wurde EXFAS zur Strukturbestimmung verwendet), auf Fe(100) Ref. [74] (hierbei wurden volldynamische LEED I(V)-Methoden benutzt) und Ref. [73] (kinematische LEED I(V)-Methoden), auf Ag(100) Ref. [71, 72] (Röntgenstreuung und Photoelektronenbeugung (XPD)) und

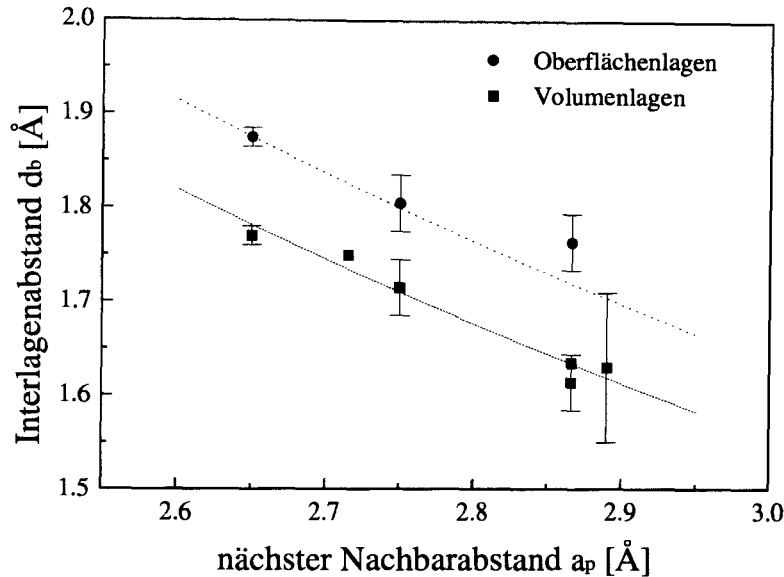


Abbildung 5.6: Volumen- Interlagenabstand in Abhängigkeit vom nächsten Nachbarabstand für dicke Mn- Filme. Die Abhängigkeit des Interlagenabstandes vom nächsten Nachbarabstand läßt sich sehr gut durch einen Fit mit Hilfe der Elastischen Theorie beschreiben (durchgezogene Linie). Dabei wird angenommen, daß den verschiedenen Mn- Filmen eine gemeinsame Struktur zugrunde liegt. Die gepunktete Linie stellt eine Übertragung des Fits auf die oberste Lage dar. In dieser Abb. wurden Daten aus den Ref. [71–76] verwendet.

auf Pd(100) Ref. [75] (volldynamische LEED I(V)- Methoden).

Bei diesen Studien werden, analog wie hier für Mn auf Cu_3Au , zwei strukturell verschiedene Phasen in Abhängigkeit von der Mn- Schichtdicke gefunden [71, 74, 75]. Darüberhinaus finden alle Studien in einem weiten Schichtdickenbereich, d.h. bis mindestens 20 ML, pseudomorphes Wachstum. Die Ergebnisse für die zweite Phase, d.h. Filme mit Schichtdicken zwischen 8 und 20 ML, sind in Abb. 5.6 dargestellt. Dabei zeigt sich, daß die Arbeiten, in denen auch zwischen tieferen und Oberflächenlagen unterschieden wurde [74, 75], ebenfalls eine Expansion der Oberflächenlagen im Verhältnis zu den tieferen Lagen finden. Bei der Betrachtung der Interlagenabstände für tiefere Lagen (Volumenlagen) (siehe Abb. 5.6) zeigt sich eine Änderung mit steigendem a_p .

Es bietet sich daher analog zu Kim et al. [74] an, die Entwicklung von c gegen a_P mit Hilfe der Formel 2.1.2.5, die sich aus der elastischen Theorie ergibt, anzufitten.

So ist es möglich, das elastische Verhalten und damit auch die aus der elastischen Theorie erwartete Änderung des c/a -Verhältnisses zu quantifizieren. Für einen solchen Fit benötigt man nicht notwendigerweise die Gleichgewichtsstruktur für dünne Mn-Schichten. Die Formel 2.1.2.5 enthält vier Parameter (c_{eq} , a_{eq} , a und γ). Von diesen Parametern kann man a als unabhängigen Parameter betrachten. a_{eq} ist eine Größe, die dann den Fit nicht beeinflusst, wenn sie innerhalb des Wertebereichs für a liegt. Der Wertebereich (und damit auch der Fitbereich) ist durch die nächsten Nachbarabstände von Cu_3Au und Ag begrenzt. Allerdings ist a_{eq} mit c_{eq} korreliert. Im weiteren wurde für a_P der Wert von Mn auf Cu_3Au $2,65 \text{ \AA}$ verwendet. Damit ergeben sich als Fitparameter c_{eq} und γ .

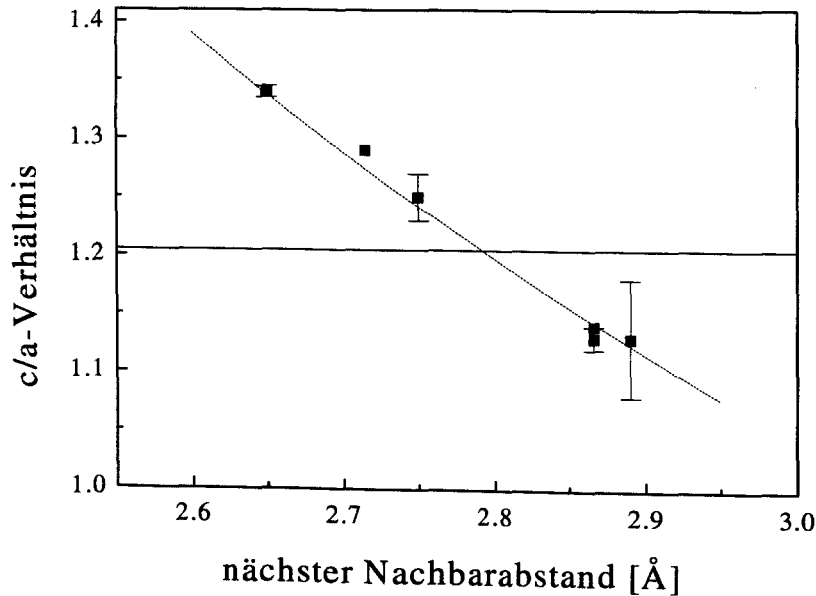


Abbildung 5.7: c/a -Verhältnis in Abhängigkeit vom nächsten Nachbarabstand für die Volumenlagen der dicken Mn-Schichten (Phase II). Alle Mn-Filme sind sehr stark tetragonal verzerrt im Vergleich zur kfz ($c/a = \sqrt{2}$) oder krz ($c/a = 1$) Struktur. Die durchgezogene Linie markiert die Mitte zwischen den c/a -Verhältnissen der kfz- und der krz-Struktur. In dieser Abb. wurden Daten der Ref. [71–76] verwendet.

Dieses bedeutet physikalisch, daß für diesen gesamten Bereich ein gleichbleibendes elastische Verhalten angenommen wird. Wir nehmen damit also an, daß Mn in dem hier untersuchten Bereich von einer kubischen, tetragonal verzerrten Grundstruktur abgeleitet werden kann. Diese Annahme wird an einer späteren Stelle überprüft und diskutiert.

Als Ergebnis dieses Fits ergibt sich die in Abb. 5.6 eingezeichnete durchgezogene Linie mit den Fitparametern $c_{eq} = 3,56 \pm 0,03 \text{ \AA}$ und $\gamma = 1,10 \pm 0,11$. Das Ergebnis für c_{eq} ist dabei direkt mit der Wahl von a_{eq} korreliert. Das führt allerdings zu keiner Änderung des Kurvenverlaufs, wie die Variation von a_{eq} zeigt. Wie in Abb. 5.6 zu sehen, beschreibt die Fitkurve, wenn man die Genauigkeit der verschiedenen Datenpunkte berücksichtigt, die Position der Werte sehr gut. Da für $\gamma = 2 * \nu / (1 - \nu)$ gilt, ergibt sich so für ν ein Wert von $0,35 \pm 0,03$. ν liegt damit für die Mn- Filme etwas niedriger als es von γ -Ni ($\nu = 0,38$) und γ -Co ($\nu = 0,40$) her bekannt ist. Dieser Wert unterscheidet sich aber deutlich von dem von Kim et al. [74] bestimmten Wert, der im Bereich 0,45 bis 0,5 liegt. Das von Kim bestimmte ν würde bedeuten, daß das Mn deutlich weicher wäre als Ni und Co und sehr stark dem γ -Fe ähneln würde. Kim verwendet zur Bestimmung des ν allerdings nur einen experimentellen Datenpunkt und einen Mn- Volumenstrukturwert als Referenzpunkt. Auf diese Weise ist es allerdings nicht möglich schlüssig das elastische Verhalten von dünnen Filmen zu beschreiben. Aufgrund der verschiedenen berücksichtigten experimentellen Daten hat daher der hier bestimmte Wert für ν das größere Gewicht.

Für die Oberflächenlagen der dickeren Schichten würde sich eine ähnliche Analyse anbieten, wenn hier mehr als die drei in Abb. 5.6 eingetragenen Datenpunkte bekannt wären. Die vorhandenen Datenpunkte lassen sich aber unter der Annahme gut beschreiben, daß man die Struktur, die für die oberste Lage des 16 ML Films bestimmt worden ist, als Aufpunkt betrachtet. Das resultierende Ergebnis ist in Abb. 5.6 dargestellt.

An dieser Stelle ist nun die Frage zu stellen, ob die Annahme plausibel ist, daß Mangan im a_p - Bereich zwischen 2,65 und 2,89 \AA basierend auf einer Grundstruktur wächst. Das heißt, was würde sich verändern, wenn es statt einer zwei verschiedene Strukturen (krz und kfz) in diesem Bereich geben würde. Falls die Annahme einer Grundstruktur die Struktur des Mn richtig beschreibt, dann handelt es sich bei der Gleichgewichtsstruktur um eine tetragonal verzerrte kubische Struktur im Übergangsbereich von kfz bis krz, d.h. im Bereich der c/a -Verhältnisse zwischen 1 und $\sqrt{2}$. Um die-

ses zu überprüfen, wurden die Strukturwerte für die Volumenlagen der zweiten Phase in Abb.5.7 eingetragen. Die Datenpunkte befinden sich in dem Bereich zwischen 1,13 und 1,34 für das c/a -Verhältnis. Auch in dieser Darstellung hat man eine gute Übereinstimmung zwischen der Fitkurve und den experimentellen Werten. Weiterhin zeigt sich, daß die c/a - Verhältnisse sehr stark von den Werten für die kfz- Struktur ($\sqrt{2}$) und die krz- Struktur (1) abweichen, obwohl die verschiedenen Mn- Filme pseudomorph aufwachsen.

Das c/a - Verhältnis für Mn auf Pd (1,25) weicht z.B. stärker von der idealen kfz- Struktur ab als von dem Wert für Mn auf Ag (1,13). Analoges gilt für Mn auf Ag im Vergleich mit der krz- Struktur ($c/a = 1$). Die tetragonalen Verzerrungen sind also größer, wenn man von zwei verschiedenen Grundstrukturen mit kfz- und krz- Struktur als wenn man von einer Grundstruktur z.B. ähnlich der Struktur von Mn auf Pd ausgeht.

Dies zeigt, daß es aufgrund der bekannten Daten eher plausibel ist, daß es sich beim Grundzustand um eine tetragonal verzerrte kubische Struktur handelt, als das sich die Strukturen für die Mn- Filme von zwei Grundzuständen ableiten. Um die Annahme einer Grundstruktur für die Mn- Filme zu überprüfen, bietet es sich z.B. an die Lücke im Bereich für a_p zwischen Pd und Fe zu schließen. Um diese Lücke zu schließen, ist z.B. Pt ein geeignetes kfz- Substrat.

Bei der Bestimmung der Struktur der ersten Mn- Phase wird ähnlich wie oben für die zweite Phase vorgegangen. Die strukturellen Parameter, die für den 5,2 ML dicken

Tabelle 5.2: Die Tabelle zeigt die Daten für Volumen Mn-Legierungen.

System	a [Å]	c [Å]	c/a - Verhältnis	Volumen [Å ³]	Quelle
MnAg (5 Gew. %)	2,6	1,75	1,34	11,82	[79]
MnNi (12 Gew. %)	2,62	1,83	1,39	12,59	[81]
MnNi (10 Gew. %)	2,63	1,79	1,36	12,35	[79]
MnPt (15 Gew. %)	2,67	1,81	1,36	12,86	[79]
MnGa (12 Gew. %)	2,67	1,79	1,34	12,77	[79]
MnCu (15 Gew. %)	2,67	1,82	1,36	12,97	[81]
MnCu (5 Gew. %)	2,68	1,80	1,34	12,93	[82]

Mn-Film bestimmt worden sind, sind in die Abbildung 5.9 eingetragen. Zusätzlich sind noch die Daten anderer bekannter Arbeiten eingetragen worden. Beim Vergleich der Parameter muß darauf geachtet werden, daß die untersuchten Systeme nicht immer die gleichen Schichtdicken untersuchen und daraus in diesem Schichtdickenbereich Unterschiede entstehen können. Das Problem der Vergleichbarkeit wird durch die spezifischen Zielsetzungen der einzelnen Studien verursacht. Man kann dies auch sehr gut an den beiden unterschiedlichen Werten erkennen, die von derselben Gruppe für das gleiche System (Mn auf Ag(100)) aber leicht unterschiedliche Mn-Schichtdicken bestimmt worden sind [71, 83]. Besonders auffallend bei diesem Vergleich ist der Unterschied zwischen Mn auf Cu₃Au und Ag [71] einerseits und Mn auf Fe andererseits [73, 74]. Hierbei ist allerdings zu berücksichtigen, daß es sich bei Fe(100) um ein ferromagnetisches Substrat handelt, das zusätzlich über eine magnetische Wechselwirkung an die Mn-Schicht koppelt. Nach Freeman et al. [84] ist für den kleinen Interlagenabstand ursächlich die antiferromagnetische Kopplung zwischen dem Fe und dem Mn. Die von Freeman postulierte antiferromagnetische Kopplung ist allerdings nicht unumstritten, da Andrieu et al. [85] experimentell eine ferromagnetische Kopplung finden. Aufgrund dieser Datenlage ist es nicht möglich mit Hilfe der Elastischen Theorie eine weiterführende Analyse der Struktur dieser Phase vorzunehmen.

Weiterhin ist noch zu klären, in welchem magnetischen Ordnungszustand Mn in den verschiedenen Phasen vorliegt. Die theoretischen Arbeiten treffen ihre Aussagen in Abhängigkeit vom c/a-Verhältnis, dem Volumen und der magnetischen Response [86–88]. Die normalerweise am direktesten zugängliche Meßgröße ist die magnetische. Magnetische Messungen an dem System wurden schon von B. Feldmann durchgeführt [16, 78]. Diese Untersuchungen wurden mit MOKE durchgeführt. Sie hatten zum Ergebnis, daß kein magneto-optisches Signal gemessen werden konnte [16, 78]. Dies kann prinzipiell drei Gründe haben. Erstens könnte die Auflösung der verwendeten Meßapparatur zu klein sein. Zweitens könnte das magneto-optische Signal der untersuchten Mn-Schichten im Bereich der Energie des verwendeten He-Ne Lasers (632,8 nm Wellenlänge) einen Nulldurchgang haben. Berechnungen der Kerr- Elliptizität in Abhängigkeit der Energie des Lichts haben allerdings gezeigt, daß das nicht der Fall ist [89]. Drittens könnten die Manganfilme im untersuchten Schichtdicken- und Temperaturbereich para- oder antiferromagnetisch sein.

Die verwendete Apparatur [16] hatte für Magnetisierung von Fe eine Auflösung im Bereich von einer ML (Suszeptibilitätsaufbau). Auch ist das magnetische Moment von Mn

ähnlich hoch oder sogar, bei dem ermittelten Volumen der dünnen Schichten, größer als das von Eisen [85]. Damit ergibt sich, daß Mn beim Wachstum auf Cu_3Au und einer Temperatur oberhalb von 100 K nicht ferromagnetisch ist. Die Konsequenz hiervon ist allerdings nicht, daß die Mn- Filme auf Cu_3Au antiferromagnetisch sind. Die Curietemperatur eines ferromagnetischen Mn- Films könnte auch unterhalb von 100 K liegen.

Man kann hier also keine direkte Aussage über den Magnetismus des Systems machen, sondern nur indirekte Aussagen mit Hilfe der geometrischen Struktur. Dieses wäre möglich, wenn man die Struktur des Mn auf Cu_3Au eindeutig mit einer Struktur, für die Antiferromagnetismus gefunden wurde, identifizieren kann.

Hinsichtlich der Struktur gibt es verschiedene Größen, die mit Aussagen von theoretischen Studien verglichen werden können. Dies ist einerseits das c/a -Verhältnis und andererseits das Volumen. Das c/a - Verhältnis wurde schon betrachtet. Daher ist es notwendig, das Volumen der verschiedenen Lagen des 16 ML Mn- Films zu betrachten. Dies ist in Abb. 5.8 für denselben Datensatz, der in Abb. 5.6 dargestellt worden ist, gezeigt. Daneben wurden Strukturdaten von Mn- Bulklegierungsphasen in dieses Diagramm eingetragen, um einen Vergleichswert für eine Volumen γ -Mn-Phase zu geben. Die dazu verwendeten Systeme sind in Tabelle 5.2 aufgeführt. Eine Mittelung der in Tabelle 5.2 angegebenen Werte ergibt für das Volumen $12,5 \text{ \AA}^3$ und für a_P einen Wert von $2,65 \text{ \AA}$. Dieses entspricht in etwa dem Wert, der für die Volumenlage des 16 ML dicken Filmes bestimmt worden ist. Hierbei muß allerdings berücksichtigt werden, daß die Mn-Volumenlegierungsphase unter deutlich anderen Bedingungen hergestellt worden sind als die epitaktischen Mn-Schichten auf Cu_3Au (Tab. 5.1). Die Proben werden durch Abschrecken einer Hochtemperaturlegierungsphase erzeugt. Es handelt sich dabei häufig um Mischphasen. Die Mn- Volumenlegierungen sind damit nicht direkt mit den epitaktischen Systemen vergleichbar. Auch stellen sie keinen Grundzustand dar, da sie häufig thermodynamisch instabil sind. Sie sollen daher insgesamt nur als Maß für das atomare Volumen von Mn im Festkörper dienen. Das atomare Volumen der Bulklegierungen ist im Vergleich zu den Werten, die sich aus den Studien der dünnen Filme ergeben, eher gering. Das atomare Volumen der Mn- Filme steigt fast linear mit steigendem a_P an. Der Wert für das atomare Volumen erreicht für die Mn- Schicht mit dem größten Interlagenabstand einen Wert von $13,6 \text{ \AA}^3$ und ist damit deutlich größer als für die Bulklegierungen. Für die Oberflächenlagen ist das atomare Volumen noch einmal deutlich größer. Es erreicht für Mn auf Fe einen Wert von ca. $14,5 \text{ \AA}^3$.

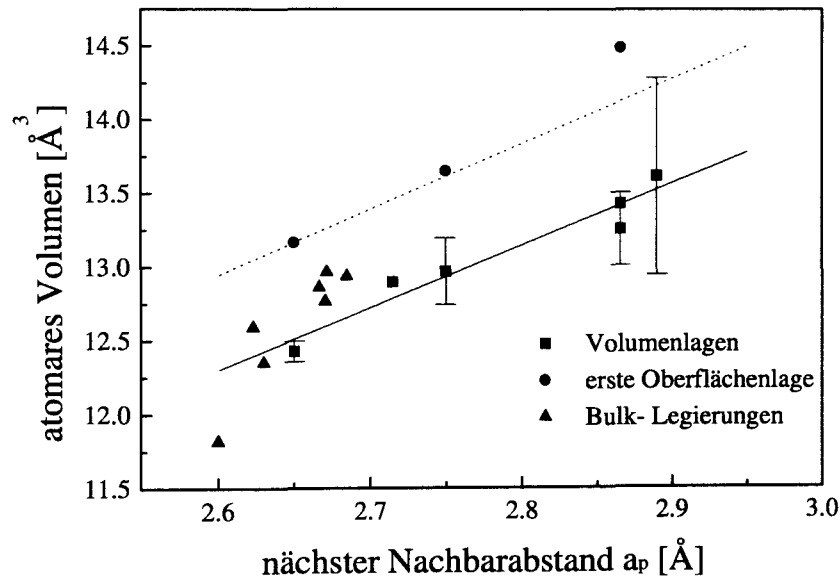


Abbildung 5.8: Volumen in Abhängigkeit vom nächsten Nachbarabstand. Sowohl für die oberste Lage als auch für die Volumenlage steigt das Volumen linear mit dem nächsten Nachbarabstand an. Die Daten für die Bulk-Legierungen geben einen Hinweis auf das Volumen von Mn als Volumenmaterial (Referenzen siehe Abb. 5.7 und [79, 81, 82]).

Man kann nun analog für die erste Mn- Phase vorgehen. Die atomaren Volumina der ersten Mn- Phase sind für den 5,2 ML Mn Film auf Cu_3Au im Vergleich mit der zweiten Mn- Phase größer. So beträgt für Cu_3Au das Volumen der obersten Lage $13,5 \text{ Å}^3$ und das Volumen für die Volumenlage (d.h. die vierte Lage) $14,2 \text{ Å}^3$. Dieses sind ca. $0,3$ bzw. $1,8 \text{ Å}^3$ oder $3,0$ bzw. $14,5 \%$ mehr im Vergleich zu der Struktur der dickeren Schicht. Diese Tendenz trifft auch für Mn auf Ag zu. Für diese Phase schwankt das Volumen je nach untersuchtem System zwischen $14,3 \text{ Å}^3$ [83] und $15,9 \text{ Å}^3$ [71]. Für Mn auf Fe hingegen liegen die Werte zwischen $11,8 \text{ Å}^3$ [74] und $12,5 \text{ Å}^3$ [76]. Damit spiegelt sich die Unsicherheit bei der Bestimmung der Interlagenabstände in einem großen Schwankungsbereich des Volumens wieder.

Wie weiter oben schon erwähnt gibt es verschiedene theoretische Arbeiten, die sich mit der Korrelation zwischen Geometrie und Magnetismus im Hinblick auf dünne Mn-Filme

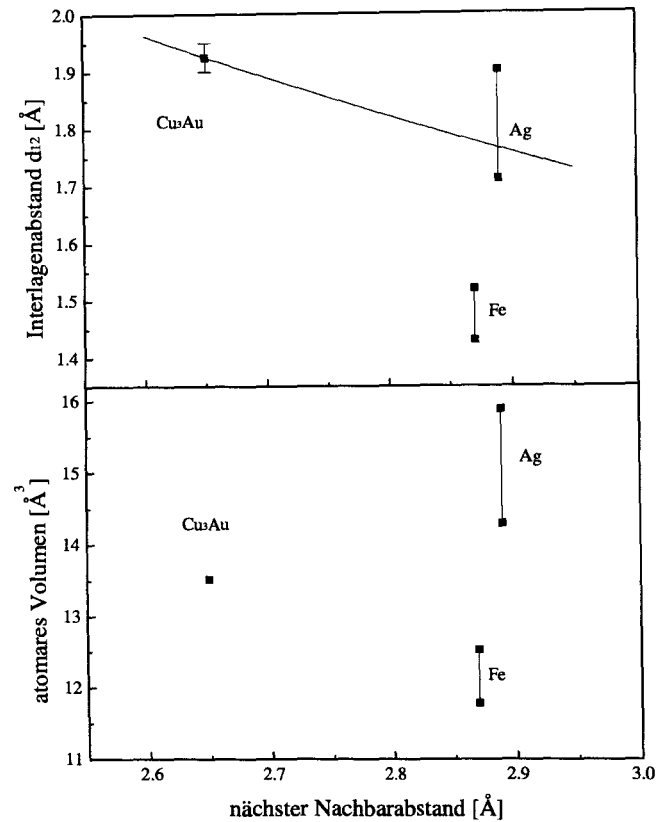


Abbildung 5.9: Interlagenabstand (oben) und Volumen (unten) gegen nächsten Nachbarabstand für dünne Mn- Filme. Es gibt für dünne Filme nur wenige Daten. Sie lassen sich auch nicht durch die Elastische Theorie beschreiben (durchgezogene Linie durch den Wert für Cu_3Au), da Kopplungseffekte (Fe- Substrat) eine wichtige Rolle spielen. Volumen und Interlagenabstände sind für dünne Filme (5,2 ML Mn/ Cu_3Au und Mn/Ag) größer als für dickere Filme Ref. [71, 74, 76, 83].

befassen. Die theoretischen Arbeiten, die sich für einen Vergleich mit den experimentell bestimmten Daten eignen, sind die Arbeiten von Crockford et al. [86] und von Krüger et al. [87].

Die Arbeiten von Crockford et al. vergleichen für ein kfz- Gitter eine kollineare mit zwei nicht-kollinearen Spinanordnungen (alle drei sind antiferromagnetische Anordnungen und entsprechen den Spindichtewellen). Außerdem bestimmen sie für alle

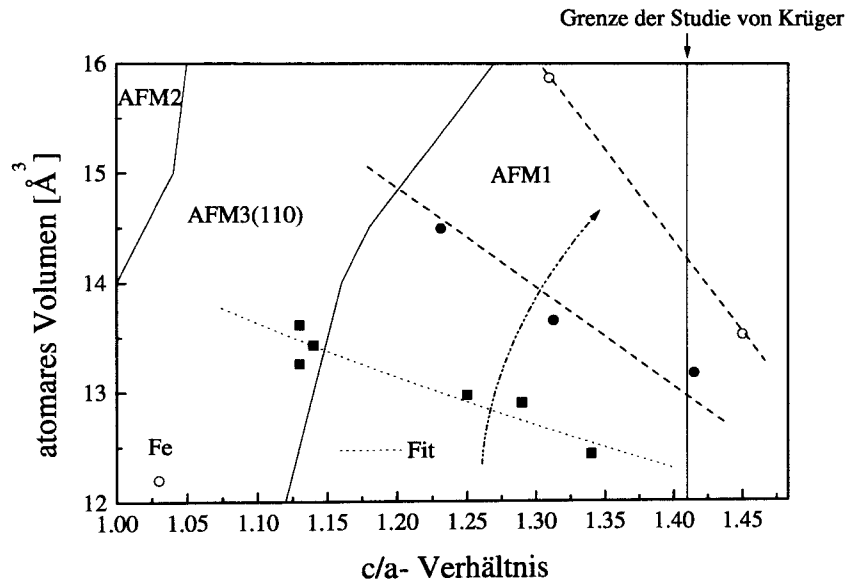


Abbildung 5.10: Volumen gegen c/a -Verhältnis Diagramm für Mn- Filme. Die Abgrenzung der verschiedenen Phasen und ihre Benennung (AFM1 etc.) ist der Arbeit von Krüger et al. [87] entnommen (c/a von 1 bis $\sqrt{2}$). Von den Volumenlagen der dickeren Schichten (Quadrate) zu den Oberflächen der dickeren Schichten (ausgefüllte Kreise) und der dünneren Schichten (offene Kreise) gibt es eine klare Tendenz zu größeren Volumina und c/a -Verhältnissen in der AFM1- Phase. Nur die Struktur von 1 ML Mn auf Fe weicht hiervon aufgrund der höheren Koordination durch die magnetische Kopplung zwischen Substrat und Mn- Schicht ab. (Referenzen siehe Abb. 5.6). Die gestrichelten Linien sind Hilfslinien. Die gepunktete der Fit aus Abb. 5.6.

drei Konfigurationen das zu erwartende c/a -Verhältnis. Dabei ergibt sich für die kollineare Spinphase (es wurde die AFM1-Phase betrachtet (einfache Spinwelle), d.h. ein schichtweiser Antiferromagnet) eine tetragonale Verzerrung von -3,8% bezogen auf ein c/a Verhältnis von $\sqrt{2}$, für die zweifache Spinwelle eine Verzerrung von 1,4 % und für die dreifache Spinwelle eine Verzerrung von 0,2 %.

Die Arbeiten von Krüger et al. beschäftigen sich mit dem Grundzustand in Abhängigkeit von Volumen und c/a -Verhältnis [87]. Sie berücksichtigen dabei eine ferromagnetische und vier kollineare- antiferromagnetische Spinanordnungen. Dabei

ergibt sich, daß die ferromagnetische Spinanordnung energetisch weitaus ungünstiger ist, als die verschiedenen antiferromagnetischen. Das Ergebnis dieser Untersuchungen ist in Abb. 5.10 dargestellt.

Zusätzlich sind die Daten der Mn-Struktur für dickere Schichten als auch für dünner Schichten in das Diagramm von Krüger et al. [87] eingetragen worden. Dabei fällt auf, daß die Daten für den 16 ML dicken Film bis auf die Volumenlagen für Mn auf Ag und Fe alle im Bereich der AFM1-Phase konzentriert sind. Aus Ref. [87] ergibt sich allerdings, daß in dem Bereich, in dem sich die Werte für die Volumenlagen von Mn auf Ag und Fe befinden, der Energieunterschied der AFM3(110) zur AFM1-Phase nur wenige meV beträgt. Ohne das Wissen über die sonstigen Beiträge zur Freien Energie kann daher keine Aussagen getroffen werden, ob Mn auf Fe und Ag eine andere magnetische Ordnung hat als Mn auf Pd oder Cu_3Au . Weiterhin fällt auf, daß es eine eindeutige Tendenz für Lagen mit einer kleineren Koordination zu größerem Volumen und größerem c/a -Verhältnis gibt. Wobei hier die dünnen Schichten von Mn auf Fe(100) eine eindeutige Ausnahme bilden. Für eine Mn-Schicht auf Fe mit einer Dicke von einer ML wurde mit einem Volumen von ca. 12 \AA^3 und einem c/a -Verhältnis von ca. 1,03 für beide Parameter die mit Abstand kleinsten Werte bestimmt. Bei der Interpretation des Diagramms ist zu beachten, daß der Parameterraum der von Krüger et al. [87] betrachtet worden ist, sich auf ein c/a -Verhältnis von 1 bis $\sqrt{2}$ erstreckt. Damit befinden sich die Werte für die Oberflächenlagen der 16 ML und der 5,2 ML Schichten auf Cu_3Au außerhalb des Parameterraums dieser Untersuchungen. Sie haben ein c/a -Verhältnis, daß größer ist als $\sqrt{2}$. Weiterhin ist hierbei zu berücksichtigen, daß bei der Interpretation dieses Diagramms keine zusätzlichen Verspannungsenergieterme betrachtet werden müssen. Eine Verspannung des Mn-Films ist in den Rechnungen von Krüger et al. [87] implizit enthalten, da der Parameterraum für c/a - den Bereich zwischen einer krz- und einer kfz-Struktur abdeckt.

Es ist aufgrund der strukturellen und magnetischen Daten also wahrscheinlich, daß Mn in einer tetragonal verzerrten AFM1 geordneten Struktur vorliegt.

5.3 Fazit

Ziel der in diesem Kapitel dargestellten Untersuchungen ist es, die Struktur von Mn auf Cu_3Au im Schichtdickenbereich bis 20 ML zu identifizieren. So sollte es möglich sein

zu prüfen, ob das erweiterte thermodynamische Konzept in der Lage ist, die strukturellen und magnetischen Eigenschaften dünner Mn- Filme zu beschreiben. Dazu wird eine vollständige, volldynamische LEED I(V)-Analyse eines 5,2 ML dicken Mn-Filmes durchgeführt. Die Struktur dieses Filmes wird zusammen mit der Struktur eines 16 ML dicken Filmes mit den strukturellen Daten anderer Mn- Systeme verglichen. Für diesen Vergleich werden die Konzepte der elastischen Theorie verwendet.

Die qualitative und quantitative Analyse der Struktur der Mn- Filme auf Cu_3Au zeigt, daß Mn nicht in einer quasihexagonalen Struktur wie Mn auf $\text{Cu}(001)$ sondern in einer pseudomorphen kubischen Struktur aufwächst. Weiter kann gezeigt werden, daß die Mn- Filme in Abhängigkeit der Mn- Schichtdicke zwei verschiedene Strukturen haben, wobei die Übergangsschichtdicke bei ca. 8 ML liegt. Diese große Übergangsschichtdicke ist sehr erstaunlich, da beide Strukturen pseudomorph sind. Weiterhin ist es außergewöhnlich, daß die Struktur, die für den 16 ML- Film gefunden wird, mit ca. 5% sehr stark tetragonal verzerrt ist.

Ein Vergleich mit den Untersuchungen anderer Gruppen an dünnen Mn- Filmen zeigt, daß die für Mn auf Cu_3Au gefundenen strukturellen Eigenschaften typisch für Mn- Filme auf Substraten mit Gitterparametern in einem Bereich zwischen 2,65 und 2,89 Å sind. Es zeigt sich, daß die tetragonalen Verzerrungen dieser Filme durch die Annahme, daß ihnen eine gemeinsame tetragonal- verzerrte, kubische Struktur zugrundeliegt, beschrieben werden kann. Im Rahmen dieser Arbeit kann allerdings nicht geklärt werden, wie sich trotz der auftretenden Verspannungsenergien die sehr stark verspannten Mn- Schichten stabilisieren können.

Ein Vergleich mit theoretischen Arbeiten zeigt, daß die Mn- Schichten aufgrund ihrer Volumina und c/a - Verhältnisse eine AFM1- Ordnung (lagenweiser Antiferromagnet) bilden sollten. Auch zeigt sich bei diesem Vergleich, daß das Volumen der Mn- Lagen mit abnehmender Koordination steigt. Eine Expansion des Volumens bedeutet für das Mn gleichzeitig eine Zunahme des magnetischen Moments [87]. Diese Zunahme des Moments könnte bedeuten, daß die Strukturen der Mn- Schichten durch ihren Magnetismus stabilisiert werden.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Ergebnisse nicht ausreichen, um das thermodynamische Beschreibungsmodell zu testen. Um einen solchen Test durchführen zu können, bedarf es weiterer Experimente zu den strukturellen und magnetischen Eigenschaften, aber in erster Linie zu den elastischen Eigenschaften dünner Mn- Filme. Auch bedarf es neuer theoretischer Konzepte, die in der Lage sind, den Grundzustand

dünnere Mn- Schichten zu beschreiben.

Kapitel 6

Dünne Eisenfilme auf einem Ni/Cu(100)-Substrat

Frühere Untersuchungen haben gezeigt, daß bei dem System Fe auf Cu(100) im Bereich der kfz- Phasen die magnetischen und die strukturellen Eigenschaften eng verknüpft sind. Dies zeigt sich besonders an zwei Eigenschaften. Zum einen steht die Richtung der Magnetisierung der kfz- Phasen im Gegensatz zur krz- Phase aufgrund der großen Oberflächenanisotropie senkrecht zur Oberfläche. Andererseits unterscheiden sich die Strukturen der ferromagnetischen und der antiferromagnetischen Phase deutlich (Abschnitt 2.5. Die ferromagnetische Phase ist tetragonal verzerrt und hat ein Volumen von $12,09 \text{ \AA}^3$ [20, 23, 24, 36]. Die antiferromagnetische Phase ist exakt kubisch mit einem Volumen von $11,6 \text{ \AA}^3$ [25, 26].

Der Versuch einer gezielten Modifikation eines Beitrags zur Freien Energie ist eine gute Möglichkeit das thermodynamische Modell zur Beschreibung der Eigenschaften dünner magnetischer Filme zu testen.

Aufgrund der engen Verknüpfung von Struktur und Magnetismus sollte das kfz- Fe/Cu- System empfindlich auf eine Modifikation eines dieser zwei Beiträge reagieren. Daher bietet es sich z.B. an, den Magnetismus unabhängig von der Struktur des Fe auf Cu(100) Films zu beeinflussen.

Um dieses Ziel zu erreichen, bedarf es eines Systems mit dem gleichen nächsten Nachbarabstand in der Oberflächenebene, wie der des Cu(100) Substrats. Dies würde den Beitrag zur Freien Energie durch die Verspannung des Films nicht verändern. Allerdings sollte dieses System auch einen kollektiven Magnetismus zeigen, d.h. es sollte

ferro- oder antiferromagnetisch sein. So könnte man gezielt die Grenzflächenenergie und den magnetischen Beitrag zur Freien Energie verändern. Falls es ferromagnetisch ist, sollte das Koerzitivfeld möglichst klein sein, damit das Gesamtsystem durch das in der Kammer erreichbare Magnetfeld von 500 Oe gesättigt werden kann. Damit scheiden ferromagnetische Einkristalle als Substrat aus. Außerdem sollte das Substratsystem möglichst einfach zu präparieren sein.

Systeme, die diese Anforderungen erfüllen, sind dünne Co oder Ni-Filme auf Cu(100). Sie wachsen bis zur kritischen Schichtdicke pseudomorph auf und sind schon als dünne Filme von wenigen Monolagen ferromagnetisch. Allerdings unterscheiden sich beide Filme leicht hinsichtlich ihrer Eignung für das Vorhaben. Co zeichnet sich gegenüber dem Ni durch eine kleinere Rauigkeit der Filme aus [90, 91]. Allerdings spricht für das Ni, daß in Abhängigkeit von der Dicke des Ni-Films die Richtung der Magnetisierung wählbar ist [92]. Außerdem ist das Kerr-Signal eines Ni-Films mit einer Schichtdicke bis 7 ML sehr klein [93], so daß es eher möglich sein sollte, die magnetischen Eigenschaften des Fe-Films gut vom Substrat zu separieren. Aufgrund dieser Vorteile wurde als Substrat ein 7 ML dicker Ni-Film auf Cu(100) gewählt. Zur Bestimmung der Eigenschaften des Substrats konnte auf verschiedene Studien zurückgegriffen werden, die sich mit dem Wachstum, der Struktur und dem Magnetismus dieses Systems beschäftigen [91–94]. Hierbei ist die Arbeit von S. Müller et al. [94] zu nennen, die sich mit der Struktur von Ni/Cu(100) beschäftigt, die RTM-Arbeit von Shen et al. [91] und verschiedene Arbeiten bzgl. des Magnetismus [92, 93].

Ziel der Experimente war das Wechselspiel zwischen Magnetismus und Struktur herauszuarbeiten bzw. den Einfluß des magnetischen Substrats auf die Struktur und den Magnetismus des Fe-Systems bestimmen zu können. Das Wachstum des kompletten Systems wurde mit Auger-Spektroskopie und MEED, die Struktur mit LEED und der Magnetismus mit MOKE untersucht.

Dieses Kapitel ist in drei Abschnitte geteilt. Im ersten Teil wird das Wachstum, im zweiten die strukturellen Untersuchungen und im dritten Teil die magnetischen Studien behandelt. Abschließend wird ein Resümee gezogen und die Ergebnisse in den Gesamtkontext eingeordnet.

6.1 Wachstum und Morphologie

Wie bei Fe auf $\text{Cu}_3\text{Au}(100)$ und Mn auf $\text{Cu}_3\text{Au}(100)$ ist auch für Fe auf $\text{Ni/Cu}(100)$ die Interdiffusion von Cu in die Ni- Schicht und eventuell auch in die Fe- Schicht von Bedeutung für die Interpretation des Wachstums und der Struktur [95].

Für das System Ni auf $\text{Cu}(100)$ konnte dabei auf Ergebnisse von Shen et al. [91] zurückgegriffen werden, die zeigen, daß Cu erst oberhalb einer Temperatur von 450 K in den Ni-Film und an die Oberfläche eines Ni-Films mit einer Filmdicke von 3,1 ML diffundiert. Für das System Fe auf $\text{Ni/Cu}(100)$ wurden eigene Untersuchungen unternommen. Dazu wurde die Intensität der Fe-Augerpeaks bei 47 und 703 eV und die Intensität der Ni-Augerpeaks bei 61 und 848 eV während des Hochheizens einer Fe/Ni/Cu(100) Probe gemessen.

Der Ni-Film hatte eine Dicke von 7 ML und wurde bei einer Temperatur von 340 K aufgewachsen. Der Fe-Film hatte eine Dicke von 2,5 ML und wurde bei einer Temperatur von 300 K aufgewachsen. Während dieser Untersuchungen wurde die Probe jeweils langsam auf die angestrebte Temperatur erwärmt. Die Temperatur wurde dann ca. 20 Minuten auf einem konstantem Niveau gehalten und die Probe danach auf 300 K abgekühlt, um bei dieser Temperatur die Augerverhältnisse zu messen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Abb. 6.1 dargestellt. Die Analyse der oberflächenempfindlichen Augerpeaks (Ni(61eV), Fe(47eV)) zeigt, daß bis zu einer Temperatur von ca. 360 K kein Ni in die oberste Fe-Lage diffundiert. Oberhalb dieser Temperatur diffundiert allerdings Ni in diese Schicht. Es wurden auch Augerpeaks untersucht, die sensitiver auf tiefer gelegene Fe- Lagen sind. Aus ihnen kann man schließen, daß der Volumendiffusionsprozess erst ab ca. 400 K verstärkt einsetzt. Diese qualitative Auger- Untersuchung zeigt, daß bei der für die Präparation gewählten Temperaturen mit keiner wesentlichen Beeinflussung der Struktur der Fe-Filme insbesondere für Filme mit einer Schichtdicke größer 2,5 ML zu rechnen ist.

Der nächste Schritt war die Charakterisierung des Wachstums. Das Wachstum der Fe und der Ni-Schichten wurde mit MEED untersucht. Hierbei wird die Intensität der MEED-Reflexe ausgewertet, um Aussagen über die Wachstumsmode treffen zu können [37]. Eine typische MEED Kurve für das Wachstum von Ni auf $\text{Cu}(100)$ ist in Abb. 6.2 dargestellt. Es zeigt sich, daß die MEED- Intensität mit zunehmender Ni- Schichtdicke stark abfällt. Dieses ist mit einer Zunahme der Stufendichte erklärbar und steht im Einklang mit Untersuchungen von Shen et al. [91] für das System Ni auf $\text{Cu}(001)$.

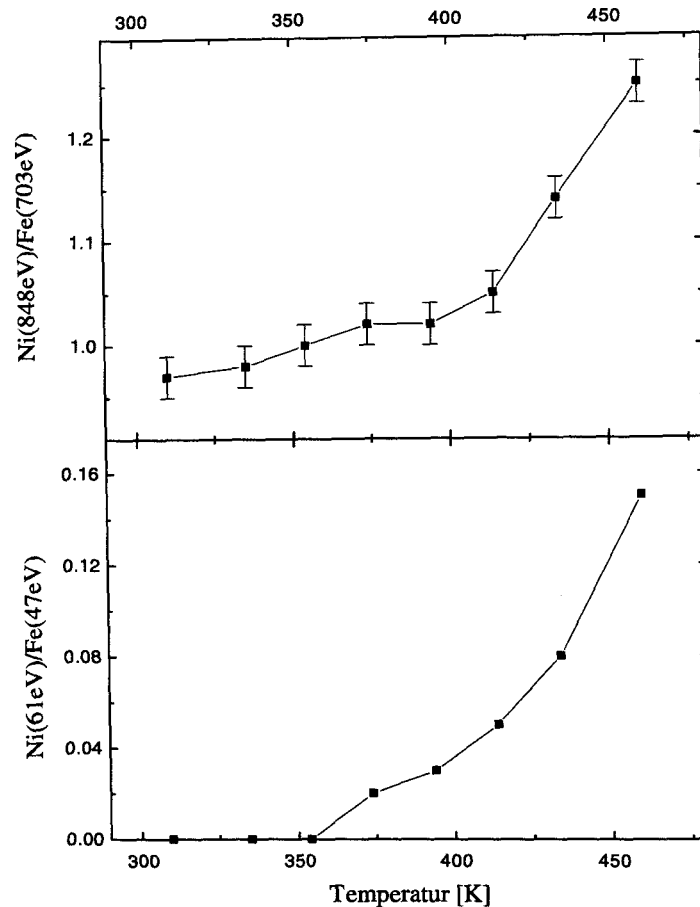


Abbildung 6.1: Temperaturabhängigkeit der Augerintensitätsquotienten ($\text{Ni}(848\text{eV})/\text{Fe}(703\text{eV})$) (oben) und ($\text{Ni}(61\text{eV})/\text{Fe}(47\text{eV})$) (unten). Die Fe/Ni Doppelschicht (2,5 ML Fe, $T_W = 300\text{K}$, 7 ML Ni, $T_W = 340\text{K}$) wurde für 20 Minuten auf der angegebenen Temperatur gehalten. Anschließend wurde der Film für die Augermessungen auf 300 K abgekühlt. Ab 360 K diffundiert Ni an die Oberfläche. Ab 400 K steigt die Volumendiffusion von Ni im Fe- Film stark an.

Diesem Abfall der Reflexintensität ist eine Oszillation überlagert, deren Amplitude ebenfalls mit der Ni-Schichtdicke abnimmt. Die Oszillationen können mit einer Oszillation der Stufendichte erklärt werden, was auf ein lagenweises Wachstum schließen lässt [37]. Die Steigerung der Stufendichte mit der Schichtdicke ist mit einer Steigerung der Filmrauhigkeit gleichzusetzen. Dieses wurde von einer qualitativen Untersuchung der Energieabhängigkeit der LEED- Reflexbreiten bei der außer- Phase- („out- of- phase“)

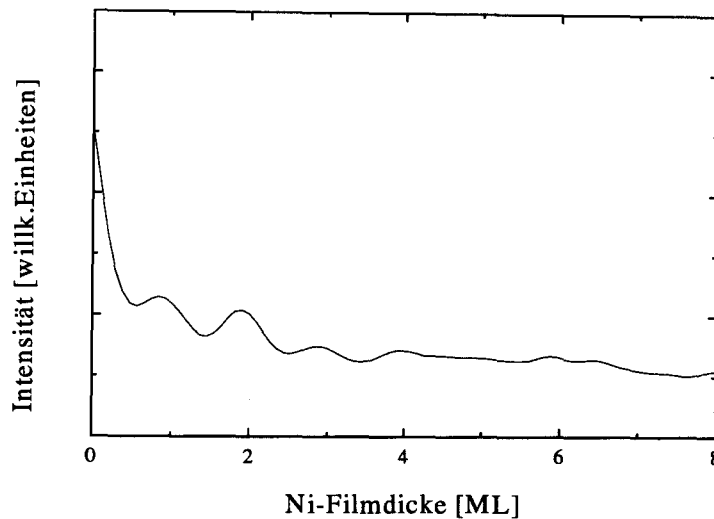


Abbildung 6.2: Abhängigkeit der MEED Intensität des (2,-3) Reflexes als Funktion der Ni-Schichtdicke während der Deposition ($E = 3 \text{ keV}$, $T_W = 330 \text{ K}$). Der Winkel zwischen dem einfallendem Strahl und der Kristalloberfläche beträgt 9° und der Polarwinkel bzgl. der $[100]$ -Richtung 4° . Die Intensität fällt während der Deposition sehr stark ab. Diesem Abfall ist bis zu einer Dicke von 4 ML eine Monolagen- Oszillation überlagert, was ein deutliches Zeichen für eine oszillierende Stufendichte und damit für lagenweises Wachstum ist.

Bedingung für die Streuung bestätigt. Da bei diesen Untersuchungen kein SPALEED (spot-profil-analysis) zur Verfügung stand, war keine quantitative Analyse möglich (Abschnitt 6.1.2 in Ref.[16] oder Ref. [50]). Aus diesen qualitativen Untersuchungen konnte abgeschätzt werden, daß die Oberflächenrauigkeit der Ni-Filme abnimmt, wenn man den Film nach der Deposition auf eine Temperatur von 400 K für 10 min heizt. Dies entspricht den Ergebnissen von Shen et al. [91]. Es ist allerdings zu beachten, daß durch das Tempern die Diffusion von Ni in die Fe- Schicht erhöht wird. Zusätzlich steigt durch den Prozess des Temperns der Restgasdruck. Hierbei wird durch die Adsorption von CO die Oberfläche der Ni-Schicht verunreinigt und so das Wachstum der Fe-Schicht beeinflusst [36].

Die LEED- Reflexe haben eine quadratische Form (Abb. 6.4). Dies führt zu der Vermutung, daß die Ni-Inseln ebenfalls quadratisch sind und ihre Kanten sich in $[011]$ -

und $[0\bar{1}1]$ -Richtung befinden. Auch diese Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit den Rastertunnelmikroskopie (RTM)- Untersuchungen aus Ref. [29].

Im nächsten Schritt wurde mit Hilfe von MEED- Studien das Wachstum von Fe auf Ni/Cu(001) untersucht. Um den Einfluß der Grenzfläche besser sichtbar machen zu können, wurden insgesamt drei verschiedene Systeme untersucht und miteinander verglichen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Abb. 6.3 dargestellt. Diese Abbildung zeigt einen Vergleich der MEED- Kurven für die Systeme Fe auf Ni/Cu(001), Fe auf Ni (getempert) /Cu(001) und Fe auf Cu(001).

Die MEED- Untersuchungen zeigen einen hohen Grad an Übereinstimmung. So kann man in allen drei Systemen zwischen drei verschiedenen Schichtdickenbereichen unterscheiden. Der erste erstreckt sich von einer Fe- Schichtdicke von 0 bis ca. 5 ML, der zweite von ca. 5 bis ca. 10 ML und der dritte Bereich beginnt ab ca. 10 ML. Die Übereinstimmung für die drei Systeme ist ab einer Fe- Schichtdicke von 5 ML am größten. Im zweiten Fe- Schichtdickenbereich finden wir für alle drei Systeme Monolagenoszillationen der MEED- Intensitäten. Analog zum Wachstum von Ni auf Cu(100) kann dieses als eine Oszillation der Stufendichte interpretiert werden, was typisch für lagenweises Wachstum ist. Der steile Abfall der MEED- Intensität oberhalb der Übergangsschichtdicke zum dritten Wachstumsbereich ist typisch für den Übergang zu dreidimensionalem Wachstum. Dieser Abfall wird gleichermaßen für alle drei Systeme beobachtet.

Es gibt allerdings auch Unterschiede im Wachstumsverhalten. Diese finden sich überwiegend im ersten Schichtdickenbereich. Für das Fe/Ni/Cu(001) System werden bis zu einer Fe- Schichtdicke von 5 ML keine MEED- Oszillationen beobachtet, sondern nur ein einziger breiter Peak. Dieses bedeutet, daß das Fe in diesem Schichtdickenbereich nicht lagenweise aufwächst. Bei dem Fe/Ni-System mit der getemperten Ni-Schicht findet man allerdings wieder Monolagenoszillationen, bei diesem System ist allenfalls das dritte und das vierte Maximum geringer ausgeprägt, als bei Fe auf Cu(100). Daher ist der Unterschied für das nicht getemperte Fe/Ni/Cu- System auf die größere Rauigkeit des Ni-Films im Vergleich zum Kupfersubstrat zurückzuführen. Diese Rauigkeit wird allerdings, wie das Maximum bei 2 ML zeigt, durch das Wachstum des Fe-Films vermindert. Auch ist der Übergang zum zweiten Fe- Schichtdickenbereich für das System mit der getemperten Ni- Schicht deutlicher ausgeprägt als für das Fe/Cu(001)- System. Allerdings sind für das System mit dem getemperten Ni- Film, wie schon erwähnt, die Intensitätsmaxima im Bereich bis 5 ML weniger ausgeprägt.

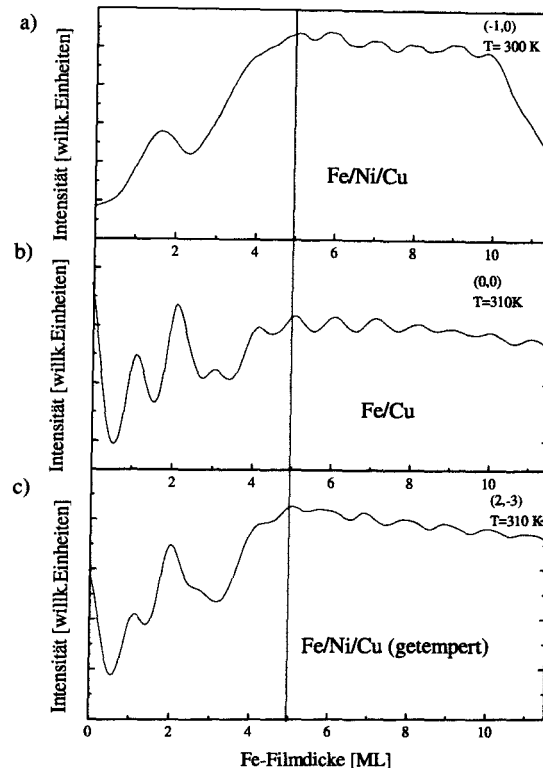


Abbildung 6.3: Vergleich der MEED- Kurven des Fe/Ni/Cu- (a), des Fe/Cu- (b) und des Fe/Ni/Cu (getempert)- Systems. (a) zeigt die MEED Intensität für den (-1,0)-Reflex für das Wachstum von Fe auf 7 ML Ni auf Cu(100) bei einer Temperatur von 300 K. Die Einstellung ist wie in Abb. 6.2. (b) Diese Kurve zeigt die typische Abhängigkeit der MEED- Intensität beim Wachstum von Fe auf Cu(100) bei 310 K. (c) Hier ist die MEED- Intensität des (2,-3)- Reflexes für das Wachstum von Fe auf einer nach der Deposition für 10 min auf 400 K geheizten Ni-Schicht auf Cu(001) gezeigt. Es ergeben sich für das Wachstum der drei Systeme jeweils drei Schichtdickenbereiche. Alle drei Systeme zeigen im Bereich zwischen 5 und ca. 10 ML lagenweises Wachstum. Oberhalb dieses Bereichs kommt es zu einem Abbruch in der Intensität in allen drei Systemen. Unterhalb von 5 ML zeigen die drei Systeme deutliche Unterschiede. Insbesondere zeigt das Fe/Ni/Cu(001)- System keine Monolagenoszillationen, im Gegensatz zum Fe/Cu(001)- System. Auch für das getemperte System sind die Oszillationen zwischen 3 und 5 ML nicht sehr ausgeprägt.

Darüberhinaus unterscheidet sich die zweite Wachstumsphase dieser Systeme nur dadurch, daß sie für die verschiedenen Systeme bis zu verschiedenen Fe- Schichtdicken reicht. Eine Vergrößerung der kritischen Schichtdicke des zweiten Bereichs wird, wie die Untersuchungen von Thomassen et al. [36] gezeigt haben, durch eine Kontaminierung der Fe-Schicht durch CO verursacht. Da er weiterhin gezeigt hat, daß eine solche Verschmutzung mit einer Veränderung des Magnetismus verbunden ist, sollte eine solche Kontaminierung nach Möglichkeit verhindert werden. Es wurde gezeigt, daß durch das CO der Ferromagnetismus der Oberflächenschichten in diesem Bereich zerstört wird [19]. Auch liegt die Übergangsschicht für das System mit der getemperten Ni-Schicht bei 13 ML, während sie sich beim nicht getemperten System bei 10 ML befindet. Dieses ist wiederum ein Argument dafür, nicht getemperte Ni-Filme als Substrat zu verwenden.

6.2 Struktur

Die Struktur des Systems Fe/Ni/Cu(100) wurde durch LEED und LEED I(V)- Studien untersucht. Die MEED- Untersuchungen hatten gezeigt, daß man für Fe auf Ni/Cu(001) drei verschiedene Schichtdickenbereiche unterscheiden kann. Daher sind für diese drei Fe- Schichtdickenbereiche und für Ni/Cu(001) in Abb. 6.4 charakteristische LEED- Bilder gezeigt.

Das LEED- Bild für Ni/Cu(001) (7 ML Ni) in Abb. 6.4 (a) zeigt das Aussehen, daß man aufgrund der bekannten RTM- Daten erwartet [91]. Die quadratische Struktur der LEED Reflexe ist gut zu erkennen, wie schon weiter oben bemerkt. Wie aus den Wachstumsuntersuchungen im vorherigen Abschnitt zu erwarten, unterscheiden sich die LEED- Bilder, die für die Strukturen über fünf Monolagen für das System Fe auf Ni/Cu(001) aufgenommen wurden, nicht von den LEED- Bildern, die in den gleichen Schichtdickenbereichen für das System Fe auf Cu(001) aufgenommen wurden. So ergibt sich für den Schichtdickenbereich zwischen 5 und 10 ML die in Abb. 6.4(c) gezeigte Struktur. Es handelt sich dabei um eine $(2 \times 1)pm2g$ Struktur. Diese Struktur entspricht sehr genau der aus den Untersuchungen von Fe auf Cu(001) bekannten $(2 \times 1)pm2g$ Struktur [24]. Die Fe- Schichtdicke beträgt bei diesem Beispiel 6 ML. Auch beim dritten Schichtdickenbereich finden wir die gleiche Struktur wie für Fe auf Cu(001) (Abb. 6.4 (d)). Der 17 ML dicke Fe-Film wurde bei einer Temperatur von 300 K ebenfalls auf 7 ML Ni auf Cu(001) aufgewachsen und nach der Präparation für 10 min auf

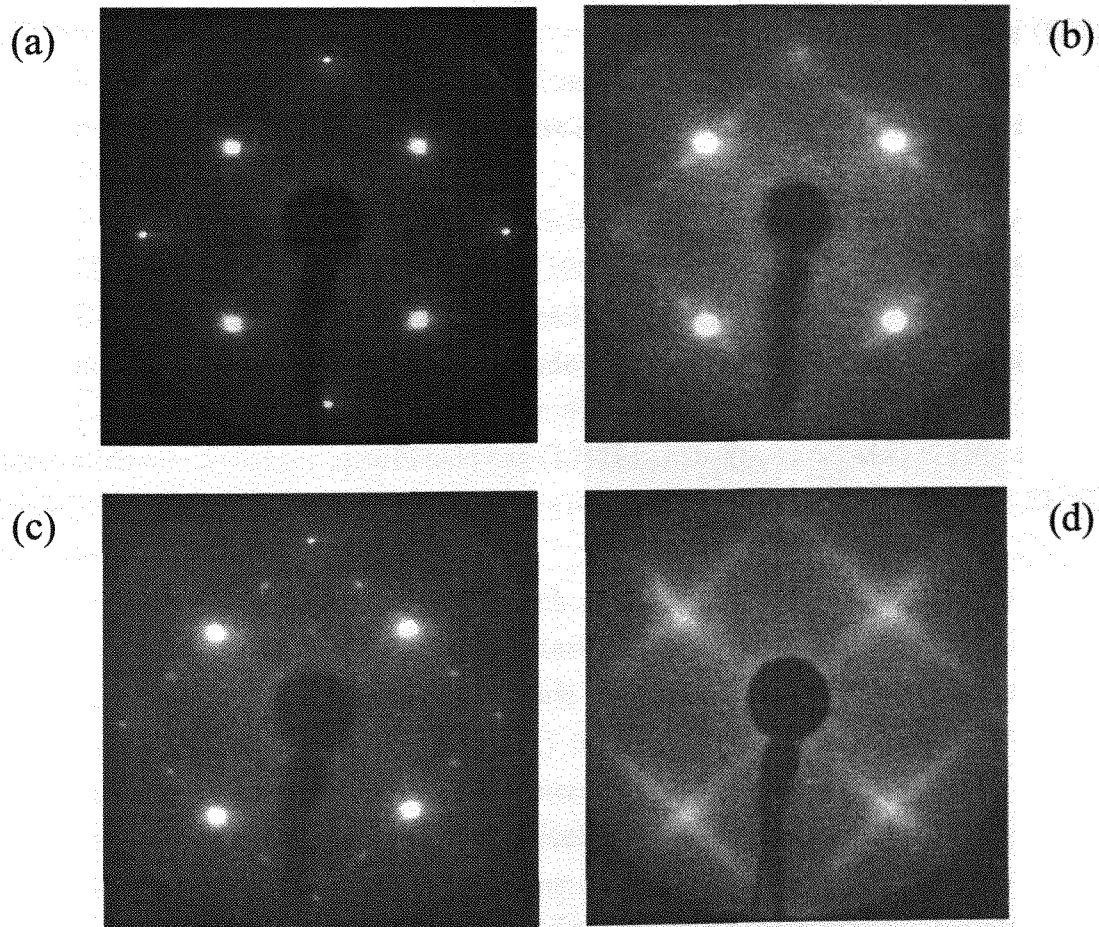


Abbildung 6.4: (a) LEED- Bild nach der Deposition eines 7 ML dicken Ni- Films auf Cu(100) ($E = 140$ eV, $T = 110$ K). Der Ni-Film wächst in einer pseudomorphen kfz-Struktur auf. Die (1,0)- Reflexe sind quadratisch. (b) Dieses LEED- Bild zeigt die schwache (4x1)-Überstruktur eines 2,5 ML dicken Fe- Films ($T_W = 310$ K) ($E = 135$ eV, $T = 100$ K). (c) Die (2x1)pm2g- Struktur wurde nach dem Wachstum von 6 ML ($T_W = 300$ K) auf Ni/Cu(100) gefunden ($E = 139$ eV, $T = 100$ K). (d) Dieses ist ein typisches Bild, wie man es für dickere Fe-Filme findet. Es handelt sich hierbei um einen 17 ML dicken krz- Film, der in einer (110)- Orientierung aufwächst ($E = 111$ eV, $T = 100$ K). Damit die Beugungsreflexe besser sichtbar sind, wurde der Fe-Film zur Glättung der Oberfläche nach der Präparation für 10 min auf 400 K erwärmt.

400 K geheizt, um die Oberflächenrauigkeit zu reduzieren. Das LEED- Bild entspricht so dem typischen Bild für die $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ Struktur, wie man es von dem System Fe auf Cu(100) kennt.

Obwohl für dünnere Fe-Schichten aus den MEED Untersuchungen eine Veränderung zu erwarten ist, finden wir auch hier eine von Fe/Cu(001) bekannte Struktur. Dabei

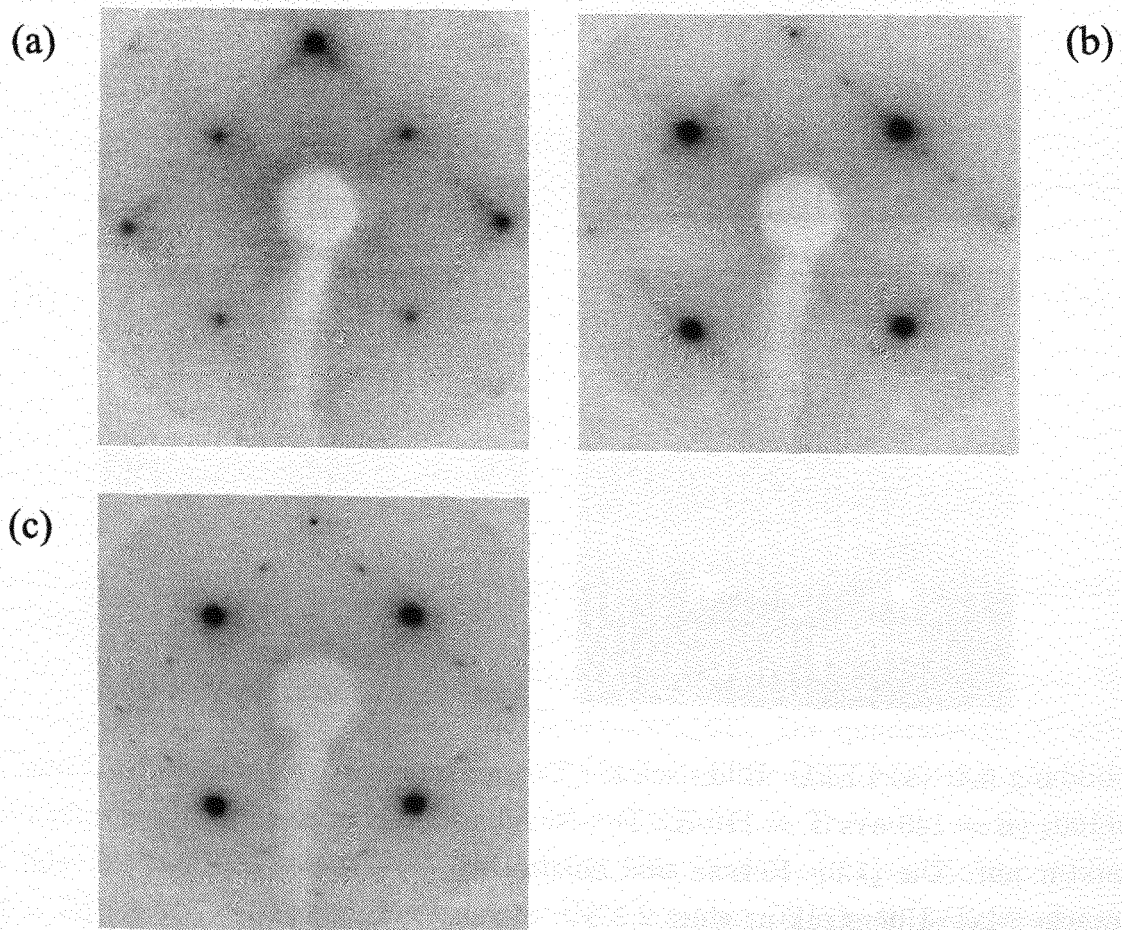


Abbildung 6.5: Vergleich von LEED- Bildern im Übergangsbereich der (4×1) - zur $(2\times 1)\text{pm}2\text{g}$ - Phase in Abhängigkeit der Fe- Schichtdicke. Bild(a) Eine (4×1) -Struktur, die für eine Fe-Schichtdicke von 2,3 ML aufgenommen wurde ($E= 169\text{ eV}$, $T= 100\text{ K}$). (b) Bild bei 3 ML Fe. Es zeigt den Übergang zwischen der (4×1) - und der $(2\times 1)\text{pm}2\text{g}$ -Struktur ($E= 139\text{ eV}$, $T= 100\text{ K}$). Bild (c) wurde bei einer Schichtdicke von 5 ML unter den gleichen Bedingungen aufgenommen wie (b). Um den schwachen Effekt besser zu verdeutlichen, sind die Bilder invertiert.

handelt es sich um eine (4x1)- Überstruktur, die nach der (1x1)- Struktur ab ca. 1,5 ML auftritt. Diese Struktur ist sehr ähnlich der (4x1)-Struktur, wie man sie auch für Fe auf Cu(100) findet [23, 24]. Analog zu der (4x1)- Struktur für Fe auf Cu(100) sind auch hier in Abhängigkeit von der Energie immer nur wenige Überstrukturreflexe erkennbar. Das Bild wurde nach der Deposition von 2,5 ML Fe bei 310 K auf 7 ML Ni/Cu(100) aufgenommen.

Allerdings gibt es in dem ersten Fe- Schichtdickenbereich auch Unterschiede in den LEED- Strukturen zwischen Fe/Cu(100) und Fe/Ni/Cu(100). Man findet für Fe/Cu(001) im ersten Fe- Schichtdickenbereich zwischen 3,5 und 5 ML auch eine (5x1)- Überstruktur [28]. Diese Überstruktur findet man nicht für Fe auf Ni/Cu(001). Dieses zeigt, daß für die Fe- Schichtdicken für die das Wachstum modifiziert ist (MEED-Daten) auch die Struktur modifiziert ist (LEED- Strukturen). Man findet also auch für das System Fe auf Ni/Cu(001) eine Korrelation zwischen Wachstum und Struktur genau wie für das System Fe auf Cu(001).

Bei dem System Fe auf Cu(001) hatte sich gezeigt, daß der Schichtdickenbereich, in dem man die (5x1)- Struktur findet, interessante magnetische Eigenschaften zeigt [22]. Daher wurde dieser Übergangsbereich zusätzlich intensiver untersucht, um die Übergangsschichtdicke zwischen der (4x1) und der (2x1)pm2g-Phase zu bestimmen und diesen Bereich genauer zu charakterisieren.

In einem ersten Schritt wurde dazu ein Fe-Keil gewachsen und für verschiedene Schichtdicken bei einer festen Energie LEED-Bilder aufgenommen. Die Schichtdicke des Keils war dabei so gewählt, daß die kleinste Schichtdicke im Bereich der (4x1) und die größte Fe-Schichtdicke im Bereich der (2x1)pm2g- Phase lag. Die dazugehörigen LEED-Bilder sind in der Abb. 6.5 dargestellt. Das Bild in Abb. 6.5(a) ist bei einer Schichtdicke von 2,3 ML Fe aufgewachsen und bei einer Energie von 139 eV aufgenommen. Man erkennt hier noch die (4x1)-Struktur mit den Überstrukturreflexen (z.B. $(1,3/4)$ und $(1,-3/4)$). Im Bild (b), das bei einer Fe-Schichtdicke von 3,0 ML und einer Energie von 139 eV aufgenommen wurde, ergeben sich zu den (4x1)- Überstrukturreflexen noch zusätzliche (2x1)- Überstrukturreflexe. Man erkennt die Koexistenz zweier verschiedener Phasen in diesem Schichtdickenbereich auch deutlich, wenn man im Übergangsbereich die Energie des Elektronenstrahls variiert. Dabei ergeben sich in Abhängigkeit von der Energie abwechselnd LEED-Bilder, wie sie für die verschiedenen Überstrukturen bei diesen Energien typisch sind.

Zur Verifikation, daß die verschiedenen Überstrukturreflexe wirklich zwei verschiede-

nen Phasen angehören, eignet sich auch ein Kontaminationsversuch. Bei einem solchen Versuch wird das System mit CO begast. Das CO adsorbiert an der Oberfläche und kann dabei die strukturellen, elektronischen oder/und die magnetischen Eigenschaften der Oberflächenschichten verändern. Versuche an dem Fe/Cu(001)- System haben gezeigt, daß die Adsorption von CO die Oberfläche der (2x1)pm2g- Struktur verändert [19]. Da die (2x1)pm2g- Phase auf der Rekonstruktion der Oberfläche beruht und die (4x1)-Phase durch die gesamte Fe-Schicht gebildet wird (für das System Fe auf Cu(001)), ist die (4x1)-Überstruktur weniger empfindlich gegen eine Kontamination der Oberfläche durch CO als die (2x1)-Phase. Ein solcher Versuch für das Fe/Ni/Cu(001)- System ergab im Übergangsbereich zwischen der (4x1) und der (2x1)pm2g- Struktur entsprechend den Vermutungen ein Verschwinden der (2x1)pm2g- Struktur. Dies zeigt, daß die verschiedenen Überstrukturreflexe durch die Überlagerung zweier struktureller Phasen erzeugt werden. Eine weitere Erhöhung der Fe- Schichtdicke führt dazu, daß nur noch die (2x1)pm2g- Überstruktur sichtbar ist.

In einem zweiten Schritt wurde versucht, den Anteil der beiden Phasen (4x1)- und (2x1)pm2g zu quantifizieren. Dazu wurden auf dem Keil sogenannte Linienscans aufgenommen. Dabei handelt es sich um die Messung der Intensität auf einer Linie, die die Hauptstrukturreflexe miteinander verbindet. Eine Abfolge dieser Linienscans ist in Abb. 6.6 dargestellt. Der erste Linienscan wurde für eine Schichtdicke von 2,3 ML Fe aufgenommen. Die Schrittweite zwischen den verschiedenen Linienscans betrug im Mittel 0,16 ML. Der untersuchte Keil reicht bis zu einer Schichtdicke von 5 ML Fe. Man erkennt in der Darstellung die drei verschiedenen Hauptstrukturreflexe und zwar von links nach rechts zuerst den (1,1)-, dann den (1,0)- und zuletzt den (1,-1)-Reflex. Die asymmetrischen Schultern des (1,1)- und des (1,-1)-Reflexes entsprechen den (4x1)-Reflexen. Die Position der (2x1)-Reflexe ist durch die beiden Linien angedeutet. Man erkennt hierbei qualitativ sehr schön, daß die Intensität der (4x1)-Reflexe mit zunehmender Schichtdicke immer kleiner und die Intensität an den Positionen der (2x1)-Reflexe immer größer wird. Der nächste Schritt ist nun diese Information quantitativ auszuwerten, indem die Intensität der verschiedenen Überstrukturreflexe ausgewertet wird. Dazu wurde, wie in Abb. 6.9 dargestellt, der Peak aus dem Spektrum ausgeschnitten und anschließend der Untergrund in einer linearen Approximation abgezogen [96]. Anschließend wird die Fläche unter der Kurve integriert. Die Daten wurden dann für die beiden symmetrie- äquivalenten Peaks addiert. Das Ergebnis ist in Abb. 6.7 dargestellt. Es zeigt sich, daß die Intensität der (4x1)-Reflexe bis zu einer Fe-Schichtdicke

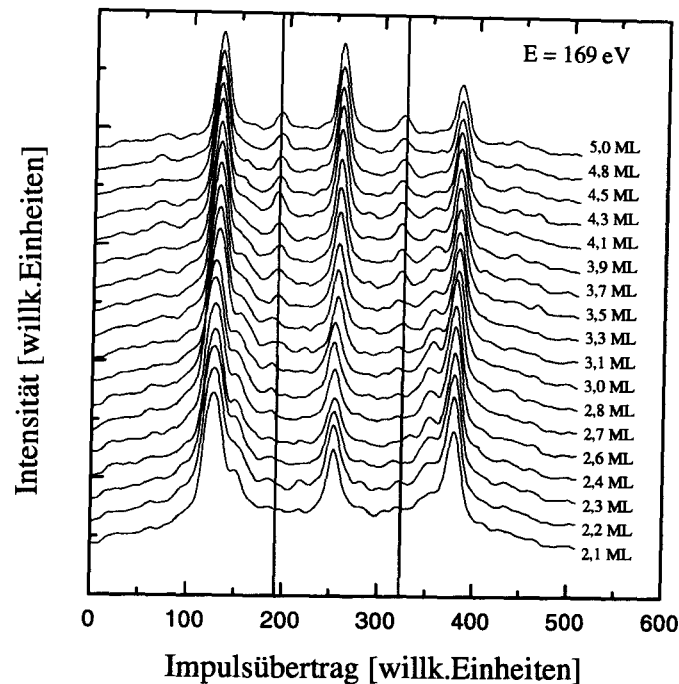


Abbildung 6.6: Übersicht über die Linienscans im Fe-Schichtdickenbereich von 2,1 bis zu 5,0 ML ($E = 169$ eV). Man erkennt von links nach rechts drei verschiedene Hauptstruktureflexe. Links den (1,1)-, in der Mitte den (1,0)- und rechts den (1,-1)-Reflex. Die Linienscans wurden bei einer Temperatur von 100 K aufgenommen. Die senkrechten Linien markieren die Position der (2x1)- Überstruktureflexe.

von ca. 2,75 ML ansteigt, um dann kontinuierlich abzufallen. Die Intensität der (2x1)-Struktur steigt von einem Basiswert unter 2,5 ML Fe bis zu einer Schichtdicke von ca. 4,3 ML Fe an. Danach fällt sie wieder leicht ab. Dieses Verhalten ist viel besser eingrenzbar als die Veränderungen der Intensität der (4x1)- Reflexe, so daß anhand des Anstiegs der Intensität der (2x1)pm2g- Reflexe im Bereich zwischen 2,5 und 4,3 ML dieser Bereich als der Übergangsbereich zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g- Phase interpretiert werden kann. Die Basisintensität des (2x1)-Reflexes kann sich durch die (4x1)-Struktur ergeben, da zu dieser Struktur an dieser Stelle ebenfalls ein schwacher Überstrukturefflex gehören sollte. Anhand der Intensität der (4x1)-Reflexe kann allerdings nicht ausgeschlossen werden, daß ein kleiner Anteil der (4x1)-Phase für Fe-Schichtdicken bis ca. 5 ML vorhanden ist. Die Ergebnisse für den Übergangsbereich

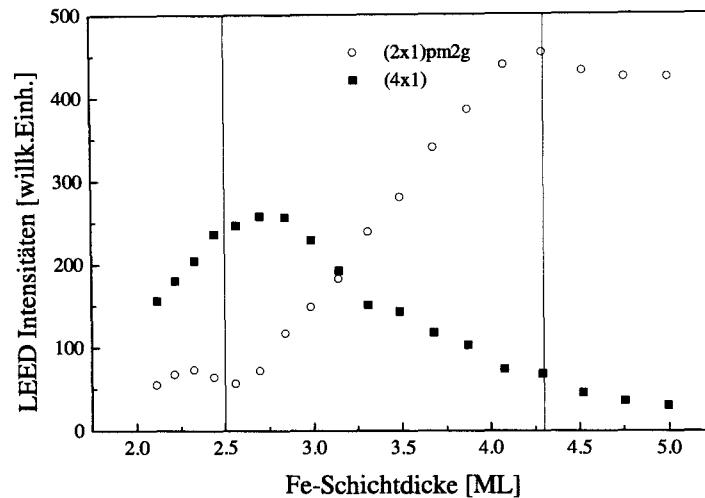


Abbildung 6.7: Abhängigkeit der Intensitäten der Überstruktureflecke der (4x1)-Phase (Quadrate) und die der (2x1)pm2g-Phase (Kreise) von der Fe- Schichtdicke. Dazu wurden die in Abb. 6.6 dargestellten Kurven verwendet. Im Bereich zwischen den Schichtdicken von ca. 2,5 ML bis zu 4,3 ML steigt die Intensität der (2x1)-Reflexe deutlich an. Die Intensität der (4x1)-Reflexe steigt bis ca. 2,75 ML und fällt danach kontinuierlich ab. Der strukturelle Übergangsbereich mit einer Koexistenz beider Phasen ist der Bereich zwischen 2,5 und 4,3 ML.

decken sich insoweit mit den Ergebnissen der MEED- Untersuchungen, als daß dort hauptsächlich für den Schichtdickenbereich zwischen 2 und 5 ML Unterschiede in den MEED-Kurven zwischen dem Fe auf Ni/Cu(100) und dem Fe auf Cu(001) System festgestellt wurden.

Um einen Vergleich mit dem Fe-System auf den getemperten Ni-Filmen zu erhalten, wurde ein analoger Versuch für ein solches System durchgeführt. Das Ergebnis dieser Untersuchungen ist in Abb. 6.8 dargestellt. Dabei zeigt sich, daß der Übergangsbereich auch für die getemperten Ni-Filme deutlich ausgeprägt ist. Allerdings ist dieser für die getemperte Schicht kleiner als für das Fe- System auf dem ungetemperten Ni-Film. Der Übergangsbereich erstreckt sich hier von 2,7 bis 4,1 ML Fe.

Die Veränderung im Schichtdickenbereich, die der Übergangsbereich abdeckt, ist damit allerdings nur unwesentlich kleiner geworden im Vergleich zur nicht getemperten

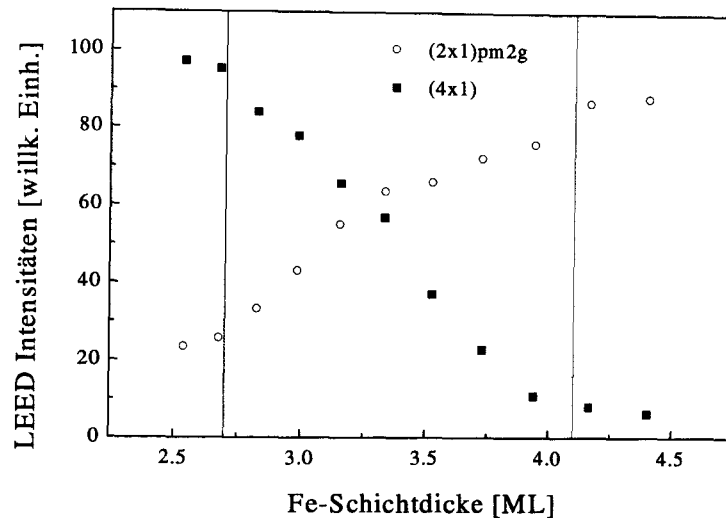


Abbildung 6.8: Abhängigkeit der Intensität der Überstrukturreflexe der (4x1)- Phase (Quadrate) und der (2x1)pm2g- Phase (Kreise) von der Fe- Schichtdicke. Dieses Fe- System wurde auf einen bei 380 K 10 min lang getemperten Ni- Film aufgewachsen. Man kann hier die Veränderung beider Parameter als Kriterium für die Festlegung des Übergangsbereichs verwenden. Dieser erstreckt sich hier von 2,7 bis 4,1 ML Fe.

Probe (Abb. 6.7). Die Unterschiede zum Fe auf Cu(001)- System verschwinden also nicht vollständig für das getemperte Fe/Ni/Cu(100) System. Dies könnte verschiedene Gründe haben. Einerseits ist die Grenzflächenrauigkeit des Fe/Ni/Cu(001) auch für die getemperte Ni- Schicht noch höher als für das Fe/Cu(001)- System [91]. Andererseits ist die Freie Energie der Grenzfläche Fe/Ni eine andere als die der Grenzfläche Fe/Cu, da die elektronischen Zustände an der Ni- Oberfläche von denen der Cu- Oberfläche verschieden sind. Dies könnte bedeuten, daß auch für eine ideal glatte Fe/Ni- Grenzfläche keine (5x1)- Überstruktur gefunden werden würde.

Neben den Studien der LEED-Bilder wurden für das Fe auf Ni/Cu(100) System bei Fe-Schichtdicken von 2,3 und 6 ML LEED I(V)-Kurven aufgenommen. Die Fe-Schichtdicken wurden dabei so gewählt, daß die beiden ersten Fe- Schichtdickenbereiche abgedeckt wurden. Das besondere Interesse bei der Untersuchung lag auf der Bestimmung des Volumens und der tetragonalen Verzerrung der verschiedenen Lagen, da bei Fe auf Cu(001) diese Größen für die Abgrenzung der ferromagnetischen und

der antiferromagnetischen Lagen wichtig sind. Auch ist es möglich die beiden Systeme (Fe/Cu(001) und Fe/Ni/Cu(001)) durch diese Größen zu vergleichen.

6.2.1 (4x1)-Phase

Um eine möglichst präzise Strukturbestimmung zu erlauben, bedarf es eines möglichst umfangreichen LEED I(V)-Datensatzes. Falls es möglich ist, ist sowohl für die Grundstrukturreflexe auch für die Überstrukturreflexe die Intensität zu bestimmen.

Für den 2,3 ML dicken Fe-Film wurden bei einer Temperatur von 115 K 14 verschiedene Grundstruktur- Kurven aufgenommen. Die verschiedenen Reflexe sind: (1,0), (0,-1), (1,1), (1,-1), (2,0), (0,-2), (2,1), (2,-1), (1,-2), (-1,-2), (2,2), (2,-2), (-2,-2). Der (1,1) und der (1,-1)- Reflex unterscheiden sich aufgrund des Tilts, der hier $2,1^\circ$ beträgt. Diese 14 Kurven decken einen Energiebereich von 3120 eV ab.

Zusätzlich werden allerdings auch noch möglichst umfangreiche Überstruktur LEED I(V)-Kurven benötigt. Dabei ergab sich allerdings durch die Nähe der Überstrukturreflexe zu den Hauptstrukturreflexen folgendes Problem. Die normalerweise während der Datenaufnahme verwendeten Routinen erlaubten es nicht die I(V)-Kurven der Überstrukturreflexe zu messen. Um diese Probleme zu lösen, wurde, wie in der Ref. [23] geschildert, vorgegangen. Diese Gruppe hatte das analoge Problem bei der Bestimmung der (4x1)-Struktur für Fe auf Cu(100) zu lösen. Dazu wurden wie bei der Intensitätsbestimmung der Überstrukturreflexe im Übergangsbereich zwischen der (2x1)pm2g und der (4x1)-Struktur Linienscans aufgenommen. Diesesmal wurde allerdings im Unterschied zu Abb. 6.6 die Energie der Elektronen variiert und nicht die Dicke des Fe-Films. Die prinzipielle Vorgehensweise ist in Abb. 6.9 veranschaulicht. Auf diese Weise wurden im Energiebereich zwischen 100 und 300 eV die Intensitäten von sechs verschiedenen Überstrukturreflexen bestimmt und zwar von den Reflexen $[(1,5/4), (1,3/4), (1,1/4), (1,-1/4), (1,-3/4), (1,-5/4)]$. Danach ergab sich eine Rohdatenkurve, wie sie in Abb. 6.10 dargestellt ist. Diese Datenkurve wurde danach auf mathematischem Weg durch einen sogenannten Smooth geglättet. Man sieht, daß durch das Glätten die Positionen der Maxima und der Minima nicht und die relativen Höhen der einzelnen Maxima zueinander nur unwesentlich verändert werden und hauptsächlich nur das Rauschen der Daten verringert wird. Nach dieser Glättung ergaben sich die in Abb. 6.11 dargestellten LEED I(V) -Kurven für die verschiedenen Überstrukturreflexe. Man erkennt deutlich, daß die ohne Tilt äquivalenten Reflexe sich

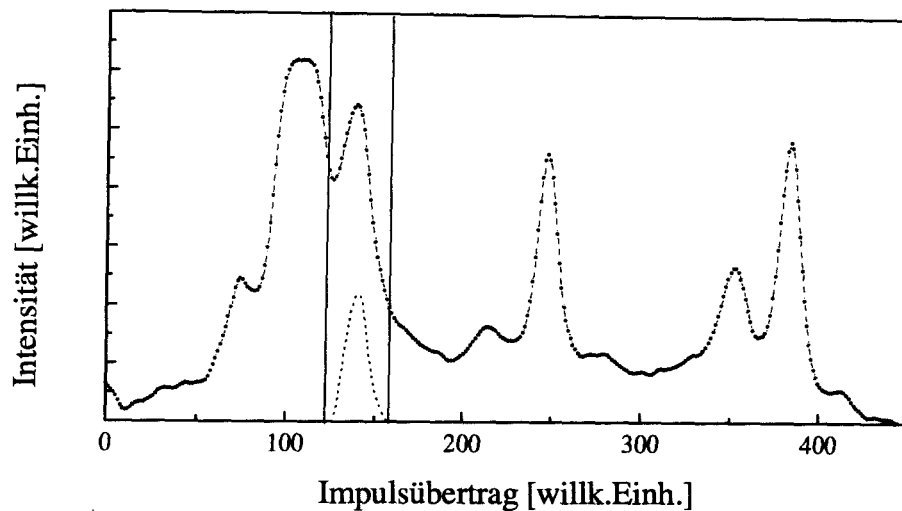


Abbildung 6.9: Bestimmung der Intensität der Überstruktureffekte. In einem ersten Schritt muß die Position des Peaks in der Gesamtkurve identifiziert werden. Im zweiten Schritt wird der Untergrund subtrahiert, wobei er linear approximiert wird. Die Fläche unter der Kurve, die man dann erhält, wird integriert und ergibt die Intensität des Reflexes.

durch den Tilt zum Teil stark unterscheiden. Dieser Unterschied ist besonders ausgeprägt für die $(1,5/4)$ - und $(1,-5/4)$ - Reflexe. Bei diesen beiden Reflexen sind nur noch die Positionen der drei Hauptmaxima gleich. Für die $(1,1/4)$ - und $(1,-1/4)$ - Reflexe ergeben sich kaum Unterschiede, da sie im Impulsraum direkt benachbart sind.

An dieser Stelle müßte nun eigentlich eine vollständige volldynamische Analyse der LEED I(V)- Daten für die Fe- Schichtdicke von 2,3 ML unter Einschluß aller Haupt- und Überstrukturdaten folgen. Dieses war mit der vorhandenen LEED I(V)- Software bei der zu erwartenden Komplexität der (4×1) - Struktur allerdings nicht möglich. Daher wurde eine eingeschränkte Analyse der Hauptstrukturdaten durchgeführt. Diese Analyse erlaubt zwar keine genaue Bestimmung der Struktur, es ist aber eine Abschätzung

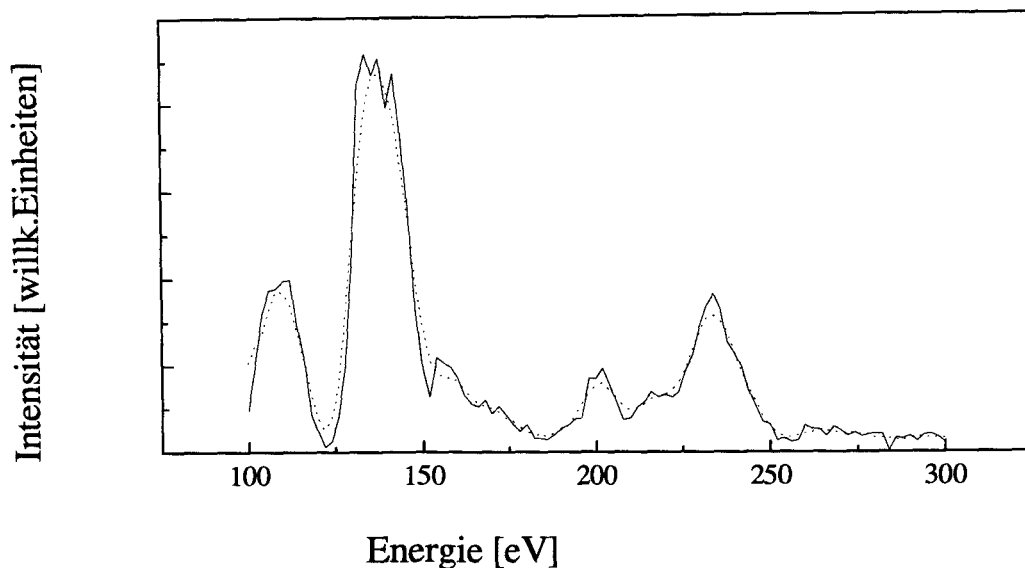


Abbildung 6.10: LEED I(V) Kurve des (1,1/4)-Reflexes (gepunktete Kurve). Die durchgezogene Kurve zeigt, wie sich diese Daten durch das Glätten verändern.

des Volumens und der Interlagenabstände möglich. Das Volumen kann dann mit dem Volumen der (4x1)- Phase von Fe/Cu(001) verglichen werden.

Für die Analyse der LEED I(V) Daten der Hauptstruktureflexe wurde ein Modell verwendet, das von zwei Oberflächenschichten aus Fe auf einem Ni-Volumen ausgeht. Dieses Modell wurde in einem Energiebereich von 70 bis 340 eV untersucht. Dabei wurde 340 eV als obere Grenze gewählt, um die Analyse vergleichbar zu machen mit der Analyse der (4x1)- Struktur auf Cu(001) [23]. Durch die Wahl der oberen Grenze ergab sich für die Hauptstruktureflexe nur ein Energieüberlapp von 1375 eV. Als bestes Strukturmodell ergab sich die in Tab. 6.1 dargestellte Struktur. Der R_p -Faktor für diese Analyse betrug 0,212. Dieser sehr gute R-Faktor bestätigt sich auch im Vergleich der theoretischen mit den experimentellen LEED I(V)-Kurven, der in Abb. 6.12 gezeigt ist. Es stimmen hier sowohl die Position der Maxima und Minima als auch die Höhe der beiden Kurven in allen Bereichen gut überein. Dieses zeigt, daß das Modell das Experiment gut beschreibt, obwohl bei dieser Analyse die Überstruktureflexe nicht

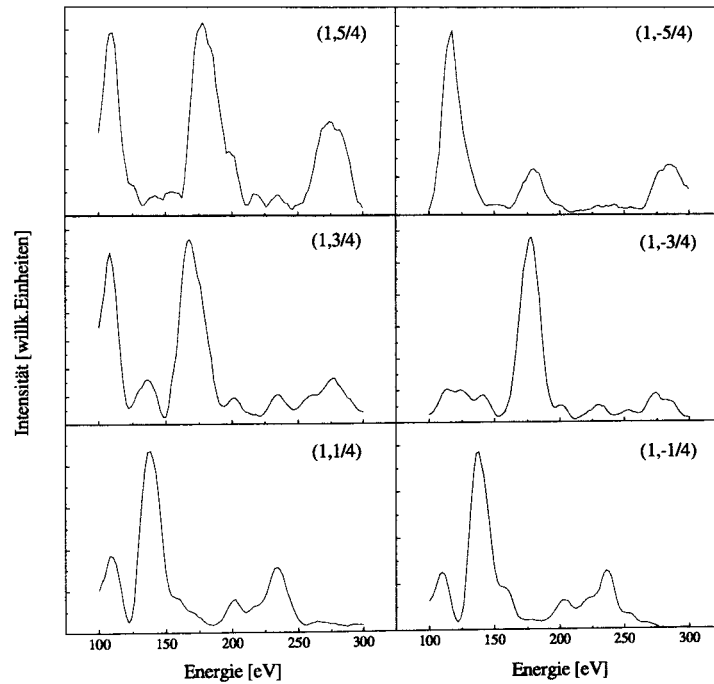


Abbildung 6.11: Überstrukturreflexe für den 2,3 ML Fe- Film. Aufgrund des Tilts unterscheiden sich die im Prinzip äquivalenten Überstrukturreflexe wie z.B. $(1,5/4)$ und $(1,-5/4)$ voneinander. Die Differenz nimmt mit zunehmendem Abstand der jeweiligen Reflexe in Impulsraum zu.

Tabelle 6.1: Vergleich der Strukturdaten von einem Fe/Ni/Cu(001)- (2,3 ML) und einem Fe/Cu(001)- Film (2 ML). Die d_{ij} sind die verschiedenen Interlagenabstände und das a_p der nächste Nachbarabstand in der Ebene. Das Fe/Ni/Cu(001)- System zeigt die etwas größeren Interlagenabstände und das etwas größere Volumen.

Parameter	Fe/Ni/Cu(001)	Fe/Cu(001)
d_{12} [Å]	1,895	1,87
d_{23} [Å]	1,92	1,84
d_b [Å]	1,80	-
a_p [Å]	2,55	2,52
V_{12} [Å ³]	12,3	11,9

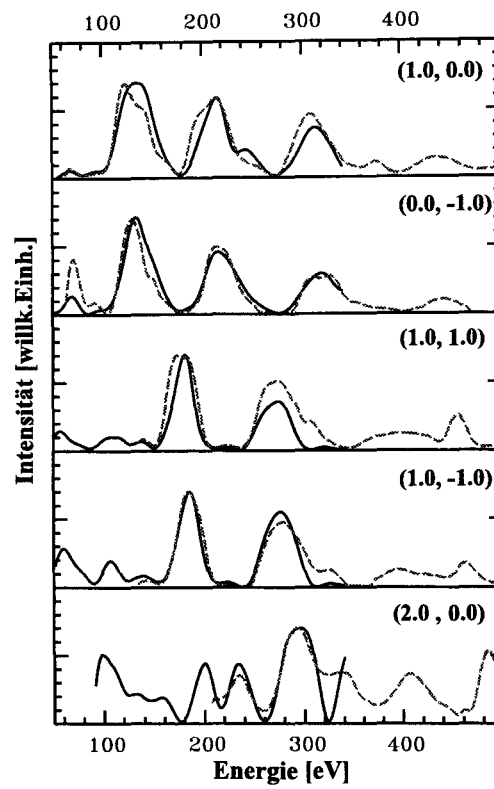


Abbildung 6.12: Vergleich der theoretischen (durchgezogene Linie) und der experimentellen LEED I(V)-Kurven für den 2,3 ML dicken Film. Dabei wurden nur die Hauptstruktureflekt analysiert und gezeigt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment.

berücksichtigt wurden.

Die atomaren Volumina der obersten Oberflächenlage der verschiedenen Schichten sind ebenfalls in Tab.6.1 eingetragen. Sie sind mit $12,3 \text{ \AA}^3$ im Vergleich mit dem atomaren Volumen von $11,9 \text{ \AA}^3$, daß für einen 2 ML Fe- Film auf Cu(001) bestimmt wurde, deutlich größer [23]. Diese Differenz nimmt im Vergleich mit den $12,1 \text{ \AA}^3$ eines 4 ML Fe- Film auf Cu(001) schon deutlich ab [23]. Wenn man berücksichtigt, daß bei der hier vorgestellten Untersuchung mit einem stark vereinfachten Modell gearbeitet wurde, stimmen sie allerdings gut überein. Zusammenfassend kann man also sagen; die (4x1)- Phasen von Fe auf Ni/Cu(001) und Cu(001) sind also sehr ähnlich, vielleicht sogar identisch.

6.2.2 (2x1)pm2g-Phase

Zur Bestimmung der Struktur der (2x1)pm2g-Phase wurde eine Schichtdicke von 6 ML gewählt. Bei der Auswahl dieser Schichtdicke waren zwei verschiedene Kriterien wichtig. Erstens sollte bei dieser Schichtdicke eine reine (2x1)-Phase vorliegen, d.h. die Schichtdicke sollte deutlich oberhalb des Übergangsbereichs zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g-Phase liegen, aber andererseits nicht zu nahe an dem Übergangsbereich zur krz(110)-Phase. RTM- Untersuchungen am System Fe auf Cu(100) haben gezeigt, daß sich die ersten Gebiete mit einer krz(110)-Struktur schon bei etwas kleineren Schichtdicken als der eigentlichen Übergangsschichtdicke zur krz(110)-Phase bilden [29]. Zweitens sollte die (2x1)-Struktur deutlich ausgeprägt sein, um sicher zu stellen, daß die gesamte Oberfläche in dieser Struktur vorliegt. Diese beiden Kriterien sind am besten für einen 6 ML dicken Fe-Film erfüllt [24,35]. Weiterhin gibt es hier direkte Vergleichsdaten mit dem Fe/Cu(001)- System [94].

Auch für diese Schichtdicke muß ein möglichst großer I(V)- Datensatz vorhanden sein, um eine präzise Bestimmung der Struktur zu gewährleisten. Da bei diesen Messungen der Cu-Einkristall durch einen Tilt von der idealen Streugeometrie abwich, unterschieden sich auch hier der (1,0)- vom (0,-1)- Reflex, so daß insgesamt die LEED I(V)-Kurven von 17 nicht symmetrie-äquivalenten Reflexen gemessen wurden [(1,0), (0,-1), (1,1), (1,-1), (-1,-1), (2,0), (0,-2), (2,1), (2,-1), (-1,-2), (2,2), (2,-2), (-2,-2), $(1, \frac{1}{2})$, $(1, -\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, -1)$, $(-\frac{1}{2}, 1)$]. Bei der Modellbildung für die (2x1)pm2g- Struktur mußten neben der (2x1)-Überstruktur auch die Symmetrieelemente der p2mg Raumgruppe berücksichtigt werden. Damit ergab sich die Modellbildung für diese Schicht im Vergleich zu den Modellen, wie sie für die Systeme Mn und Fe auf Cu₃Au verwendet wurden, als weitaus komplizierter. Zur Erstellung des Modells wurde von dem Realraummodell ausgegangen, wie es sich für die (2x1)pm2g- Phase des Systems Fe auf Cu(100) ergeben hat. Dieses Modell ist in Abb. 6.13 dargestellt. Es gibt hierbei einen zusätzlichen strukturellen Parameter s_d , der die Verschiebung der Reihen in der [011]-Richtung beschreibt, wobei diese Reihen abwechselnd in plus und in minus [011]-Richtung verschoben sind. Um die Verschiebung in dem Modell zur Berechnung der LEED I(V)-Spektren abbilden zu können, mußten zwei Fe-Atome pro Oberflächenlage berücksichtigt werden. Weiterhin wurden, um die erwartete Expansion der obersten zwei Atomlagen abbilden zu können, drei Oberflächenlagen und eine zusätzliche Volumenlage unabhängig variiert. Dieses führte dazu, daß sich der Rechenaufwand gegenüber den Rechnungen zu den

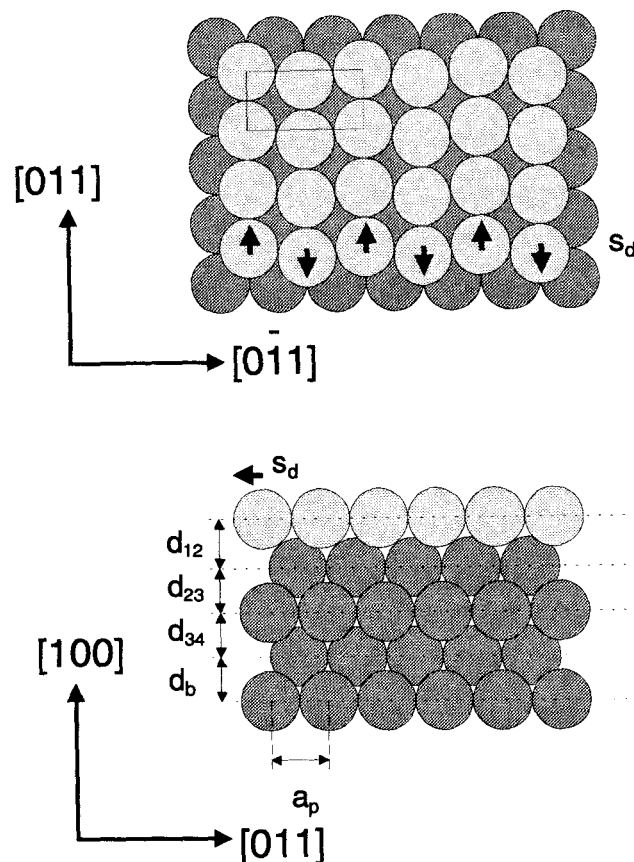


Abbildung 6.13: Realraumstrukturmodell der ersten 5 ML Fe der $(2 \times 1)pm2g$ -Phase. Die obere Abbildung zeigt die Aufsicht und die untere Abbildung zeigt die Seitenansicht.

Modellen Mn und Fe auf Cu_3Au stark erhöhte. Das wurde noch dadurch verstärkt, daß die Rechnungen bis zu einer maximalen Energie von 500 eV durchgeführt wurden. Der Energieüberlapp zwischen Modell und Experiment betrug 4234 eV.

Analog zu dem in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Verfahren wurden mit diesem Modell die Rechnungen durchgeführt, wobei der Tilt bestimmt werden mußte und die verschiedenen strukturellen und nicht strukturellen Parameter optimiert wurden. Hier wurde neben dem Pendry-Faktor [56] und R_{de} [58] auch der Zanazzi-Jona R-Faktor R_{ZJ} [57] berücksichtigt (siehe Abschnitt 3.4). Der Tilt ergab sich für diese Probe zu $1,4 \pm 0,2^\circ$. Die Strukturen, die die kleinsten R-Faktoren ergeben, sind in der Tabelle 6.2 aufgelistet. Die Tabelle zeigt, daß die besten Modelle für die verschiedenen R-Faktoren ausgesprochen gut übereinstimmen. Die Abweichung der verschiedenen strukturellen

Parameter ist kleiner als 0,01 Å. Bei dieser sehr guten Übereinstimmung ist hervorzuheben, daß den R- Faktoren verschiedene Kriterien bei der Bestimmung der Güte des Modells zugrunde liegen.

Die Güte des Modells zeigt auch ein visueller Vergleich der experimentellen mit den theoretischen LEED I(V)-Kurven anhand der in Abb. 6.14 gezeigten Kurven. Man erkennt hier sehr schön, daß sowohl die Maxima und Minima der Hauptstrukturreflexe als auch der Überstrukturreflexe sehr gut für beide Kurven übereinstimmen. Auch die Kurvenform und die relativen Intensitäten stimmen sehr gut überein, wie dies auch durch die sehr niedrigen R-Faktoren angezeigt wird. Es ist also anzunehmen, daß die besten Modelle sehr gut die reale Struktur des 6 ML dicken Fe-Films auf Ni/Cu(100) beschreiben. Die Fehler der Modelle wurden mit Hilfe der Formeln 3.4.3.1 ermittelt. Mit diesem Fehler wurde anhand der in Abb. 6.15 dargestellten Abhängigkeiten des R_p -Faktors von den strukturellen Parametern die Fehlerbereiche des besten Gesamt-

Tabelle 6.2: Strukturdaten des 6 ML Fe/Ni/Cu(001) Films für die verschiedenen R-Faktoren. Die Tabelle zeigt die strukturellen und nicht-strukturellen Parameter der Modelle, die für die drei verschiedenen R-Faktoren jeweils die niedrigsten Werte ergeben. Die d_{ij} sind die Zwischenlagenabstände zwischen der i-ten und der j-ten Lage. Θ_{Di} ist die Debyetemperatur der i-ten Lage und a_p der nächste Nachbarabstand senkrecht zur Oberflächennormalen. Der Index b bezeichnet jeweils die Parameter der Volumelage des Modells. s_d ist der Betrag der Verschiebung der Reihen der Atome in der obersten Lage in der [011]- Richtung.

Parameter	$R_p = 0,155$	$R_{DE} = 0,210$	$R_{ZJ} = 0,046$
d_{12} [Å]	1,880	1,885	1,885
d_{23} [Å]	1,795	1,795	1,795
d_{34} [Å]	1,770	1,780	1,780
d_b [Å]	1,780	1,770	1,770
a_p [Å]	2,54	2,54	2,54
Θ_{D1} [K]	225	245	245
Θ_{D2} [K]	320	335	335
$\Theta_{D3} = \Theta_{Db}$ [K]	470	470	470
s_d [Å]	0,18	0,19	0,18

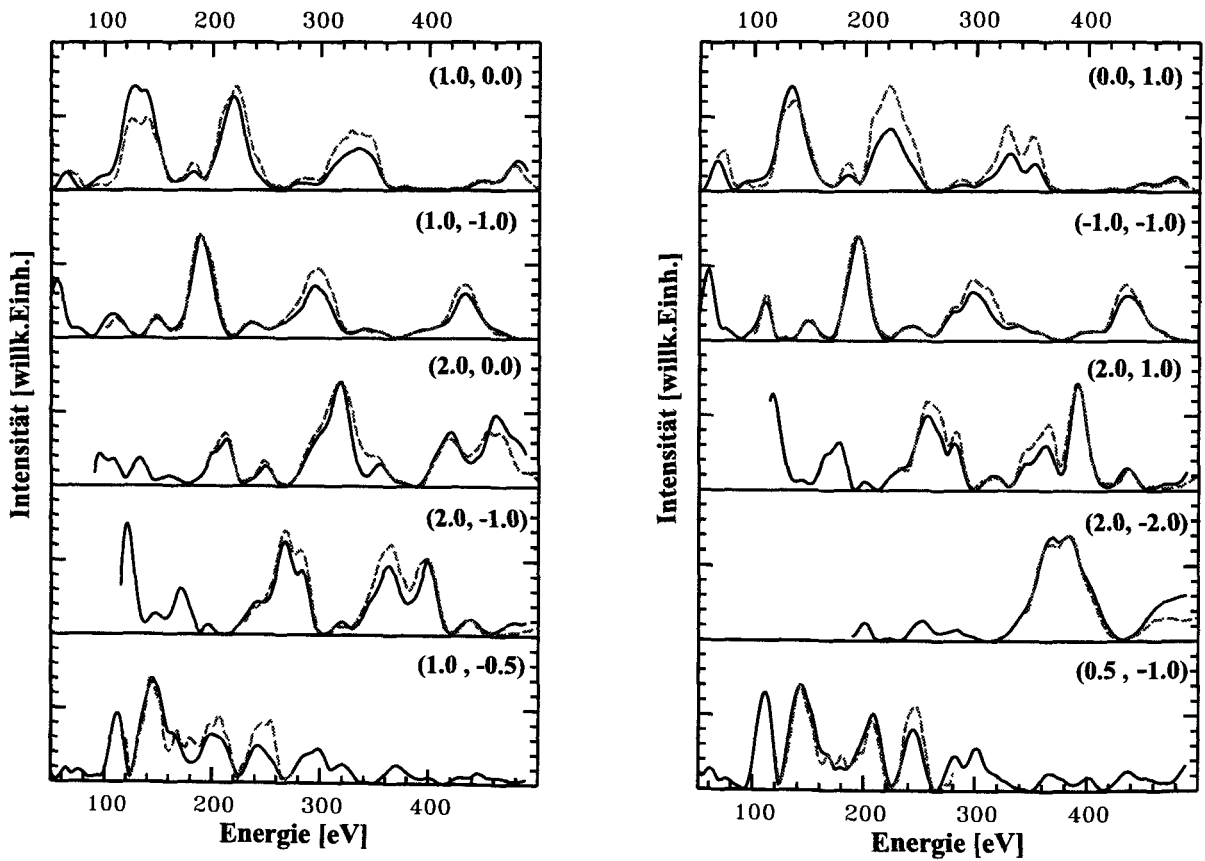


Abbildung 6.14: Vergleich des theoretischen Modells mit dem niedrigsten Pendry-Faktor (durchgezogene Kurve) mit den experimentellen $I(V)$ -Kurven für den 6 ML Fe-Film. Beide Kurven stimmen sehr gut in den Positionen der Intensitätsmaxima, der -minima und der Kurvenform überein.

Modells bestimmt. Damit ergeben sich dann für dieses Modell die in Tab. 6.3 angegebenen Werte.

Zusätzlich sind noch die Ergebnisse einer Untersuchung von S. Müller et al. [24] zur Bestimmung der Struktur eines 6 ML Fe-Films auf Cu(100) durch LEED $I(V)$ angegeben. Ein Vergleich beider Strukturen zeigt, daß sie innerhalb der Fehlergrenze identisch sind. Für den 6 ML Fe-Film auf Ni/Cu(100) ergibt sich dabei ein atomares Volumen der obersten Lage von $12,13 \text{ \AA}^3$, der zweiten Lage von $11,58 \text{ \AA}^3$ und der Volumenlage von $11,48 \text{ \AA}^3$. Auch dieses entspricht sehr gut den Werten für Fe auf Cu(001).

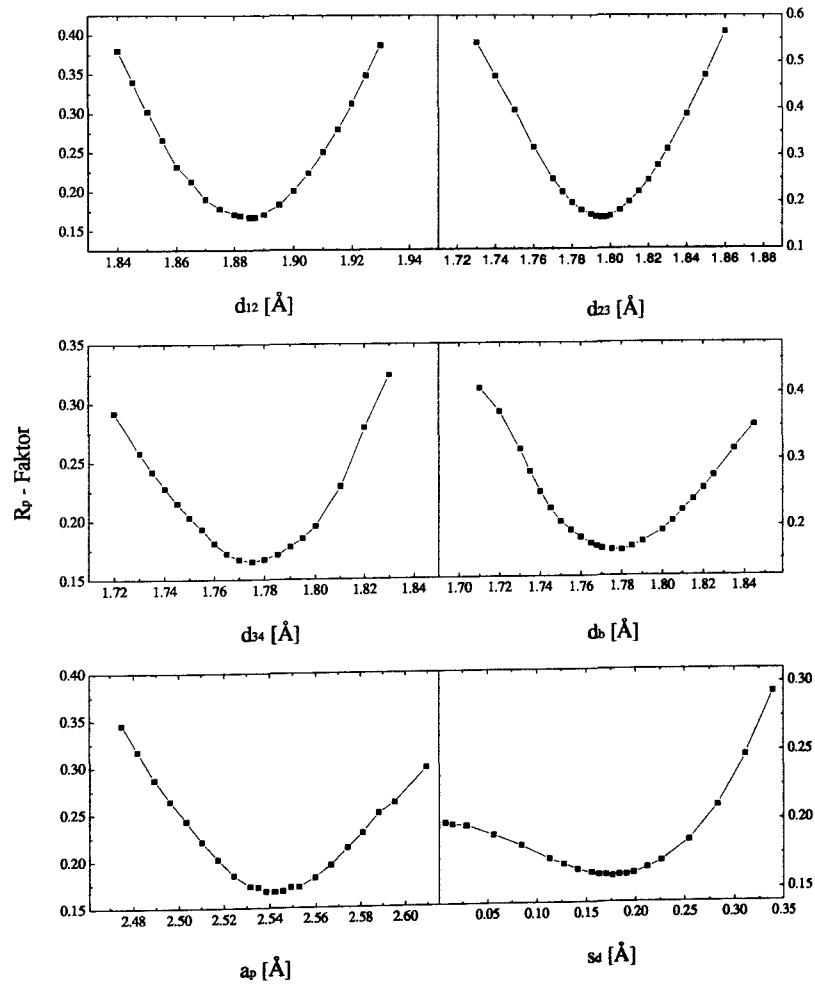


Abbildung 6.15: Abhängigkeit des Pendry R-Faktors von den verschiedenen strukturellen Parametern. Die im Verhältnis zum Fehler scharfen Minima erlauben eine sehr genaue Bestimmung der strukturellen Parameter.

Tabelle 6.3: Vergleich der Strukturdaten für jeweils 6 ML Fe für Fe/Ni/Cu(001) und Fe/Cu(001) [24].

Parameter	Fe/Ni/Cu (001)	Fe/Cu(001)
d_{12} [Å]	$1,880 \pm 0,01$	$1,870 \pm 0,011$
d_{23} [Å]	$1,795 \pm 0,01$	$1,780 \pm 0,012$
d_{34} [Å]	$1,770 \pm 0,02$	$1,760 \pm 0,020$
d_b [Å]	$1,780 \pm 0,02$	$1,780 \pm 0,020$
a_p [Å]	$2,54 \pm 0,02$	$2,52 \pm 0,015$
s_d [Å]	$0,18 \pm 0,05$	$0,18 \pm 0,06$

6.2.3 Fazit

Die Struktur und das Wachstum dünner Fe-Schichten auf Ni/Cu(100) wurde mit Hilfe von MEED-, LEED- und LEED I(V)- Studien untersucht. Dabei zeigt sich, daß die Struktur und das Wachstum des Systems Fe/Ni/Cu(001) der Struktur und dem Wachstum des Systems Fe auf Cu(001) sehr ähnlich ist. Man findet für Fe/Ni/Cu(001) genauso drei verschiedene Fe- Schichtdickenbereiche. Auch die Übergangsschichtdicken zwischen den drei Bereichen stimmen sehr gut überein.

Der dritte Schichtdickenbereich ist quasi- identisch. Er beginnt für Fe/Ni/Cu(001) genau wie für Fe/Cu(001) bei einer Schichtdicke von ca. 10 ML. Außerdem findet man dort für beide Systeme auch eine krz(110)- Struktur.

Auch im zweiten Schichtdickenbereich zwischen ca. 5 und ca. 10 ML Fe sind sowohl Wachstum als auch Struktur von Fe/Ni/Cu(001) und Fe/Cu(001) fast identisch, wie die volldynamische Analyse eines 6 ML Film ergab. In diesem Schichtdickenbereich hat Fe eine kfz- Struktur, die im LEED durch eine (2x1)pm2g Überstruktur gekennzeichnet wird.

Es finden sich allerdings auch Unterschiede zwischen beiden Systemen. Diese finden sich im Schichtdickenbereich unterhalb von 5 ML Fe. Zwar beobachtet man hier für das Fe/Ni/Cu(001)- System analog zum Fe/Cu(001)- System auch eine (4x1)- Überstruktur und die dazu gehörige Struktur zeigt eine große Ähnlichkeit mit der Struktur von Fe/Cu(001). Aber man findet für Fe/Ni/Cu(001) keine (5x1)- Überstruktur. Stattdessen beobachtet man im Fe- Schichtdickenbereich zwischen 2,5 und 4,3 ML einen

kontinuierlichen Übergang zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g- Phase mit einer Koexistenz beider Phasen. Dieser Unterschied kann mit einer Änderung der Grenzflächenrauigkeit und der Grenzflächenenergie erklärt werden.

Aufgrund der sehr großen Ähnlichkeit zwischen den beiden (4x1)- Phasen und der somit zu erwartenden Übereinstimmung der strukturellen Eigenschaften ergibt sich damit das in Abb. 6.16 gezeigte Modell der Strukturen der verschiedenen kfz Fe-Phasen auf Ni/Cu(001).

In der Abb.6.16 sind vier verschiedene Bereiche mit insgesamt zwei verschiedenen kfz-Phasen und einer krz-Phase gezeigt. Es gibt also für das System Fe auf Ni/Cu(100) Phasen, die den für Fe auf Cu(100) auftretenden Phasen sehr ähnlich sind.

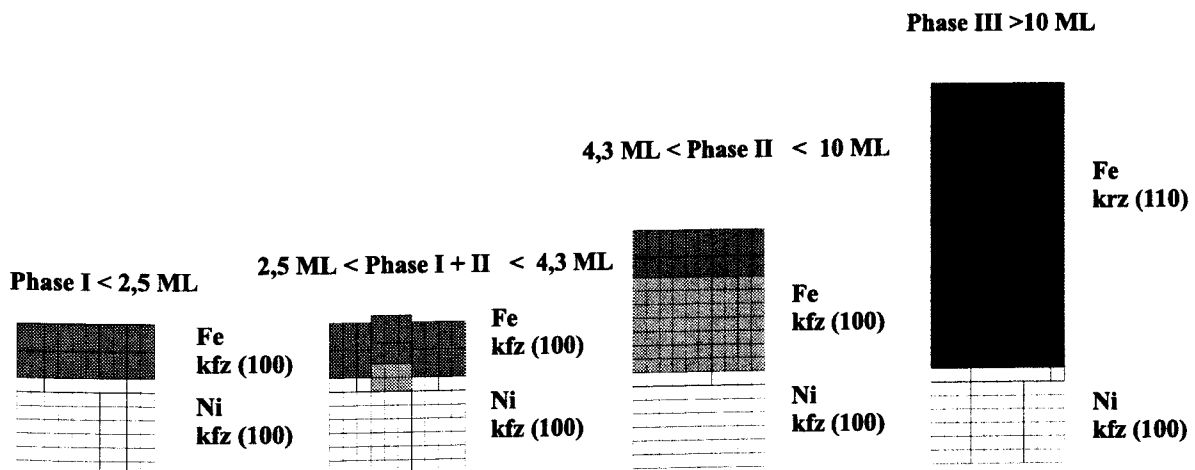


Abbildung 6.16: Strukturmodell für Fe/Ni/Cu(001). Bis zu einer Schichtdicke von ca. 2,5 ML findet man eine tetragonal verzernte kfz-Phase mit einem atomaren Volumen von ca. $12,3 \text{ \AA}^3$. Im Bereich zwischen 2,5 und 4,3 ML geht diese Phase in eine kfz Phase über deren oberste Atomlage eine ähnliche Struktur hat, die darunterliegenden Lagen sind allerdings fast exakt kubisch mit einem kleineren Volumen von ca. $11,5 \text{ \AA}^3$. Im Schichtdickenbereich zwischen 4,3 und 9 ML liegt diese Phase, für die eine (2x1)pm2g- Überstruktur gefunden wird, rein vor. Bei einer Schichtdicke von ca. 9 ML findet ein zweiter Phasenübergang zur krz- Volumen Fe-Phase vor, die hier in einer (110)-Orientierung aufwächst.

6.3 Magnetismus

In diesem Abschnitt werden die magnetischen Untersuchungen an dem System Fe auf Ni/Cu(100) vorgestellt. Ziel der Studien war es, den Einfluß einer magnetischen Grenzfläche auf die kfz-Strukturen von Fe zu untersuchen, ohne dessen strukturelle Eigenschaften zu verändern. Wie der vorherige Abschnitt gezeigt hat, ist dieses Ziel für die strukturellen Eigenschaften bis auf die Ausnahme des Bereichs zwischen 2,5 und 4,3 ML Fe erfüllt.

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Messungen zeigen, soweit nicht anders vermerkt, die Ergebnisse von MOKE-Untersuchungen in longitudinaler Geometrie, wobei die Polarisationsrichtung des eingestrahlten Lichts senkrecht zur Oberfläche des Cu-Kristalls stand. Weiterhin wurden diese Messungen, falls nicht anders vermerkt, bei einer Temperatur von ca. 110 K durchgeführt. Das Magnetfeld lag während aller Messungen parallel zu einer Leichten Richtung des Gesamtsystems, d.h. einer Richtung in der die geringste Energie aufgewendet werden muß, um das System umzumagnetisieren. Dies entspricht bei Fe auf Ni/Cu(001) einer kfz[001]-Richtung.

Dieser Abschnitt ist zweigeteilt: Im ersten Unterabschnitt werden die Ergebnisse der Untersuchungen vorgestellt. Diese werden dann im zweiten Unterabschnitt interpretiert und diskutiert.

6.3.1 Ergebnisse

7 ML Ni auf Cu(001)

Da man den magneto-optischen Kerr-Effekt nicht elementselektiv messen kann, bietet es sich an dieses Subsystem zuerst ohne Fe-Abdeckung zu untersuchen, um den Anteil der 7 ML dicken Ni-Schicht an dem gesamten MOKE-Signal bestimmen zu können. Aus den Untersuchungen von Wu et al. [93], Bochi et al. [92] und anderen erwartet man, daß die Magnetisierung einer Ni-Schicht dieser Dicke in der Ebene liegt. Allerdings ist der Übergang zur senkrechten Magnetisierung für nur unwesentlich dickere Schichten zu erwarten. Nach den MOKE-Untersuchungen von Wu et al. [93] ist außerdem mit einem sehr geringen MOKE-Signal zu rechnen, was auch im Einklang mit den theoretischen Untersuchungen von Oppener et al. [97] steht. An dieser Stelle muß allerdings ausdrücklich betont werden, daß ein kleines MOKE-Signal nicht immer eine

kleine Magnetisierung bedeutet. Dieser Schluß kann nur für Studien gezogen werden, bei denen das gleiche chemische Element mit dem Licht der gleichen Wellenlänge untersucht wurde. Es ist schon im Abschnitt 3.3 erwähnt, daß die Größe des magneto-optischen Kerr-Effekts neben der Magnetisierung auch von der Wellenlänge des eingestrahlten Lichts und der chemischen Zusammensetzung des Ferromagneten abhängt. Dies sind auch die Gründe warum das MOKE-Signal einer 7 ML Ni-Schicht bei einer Wellenlänge des Lichts von 632,8 nm so klein ist.

An dem 7 ML dicken Ni-Film wurden sowohl Messungen in polarer als auch in longitudinaler Geometrie durchgeführt. Dabei ergab sich für die polare Geometrie kein Signal. Das Ergebnis für die longitudinale Geometrie ist in Abb.6.17 dargestellt. Es ergibt sich dabei eine Hysteresekurve mit einer Sättigungsmagnetisierung von $3,1 \pm 1,4 \mu\text{rad}$. Das Rauschen bei dieser Kurve ist im Vergleich zum Signal relativ hoch. Dies ist auf die geringe Größe des MOKE-Signals in Verbindung mit den relativ ungünstigen Versuchsbedingungen (Tieftemperaturmessung, Anhang B) zurückzuführen. Die Koer-

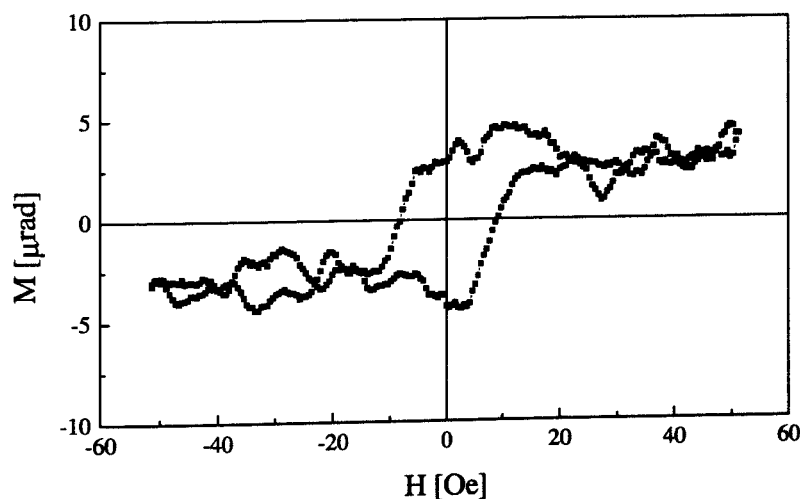


Abbildung 6.17: Hysteresekurve eines 7 ML dicken Ni-Films auf Cu(001). Dazu wurde der magneto-optische Kerr-Effekt in longitudinaler Geometrie vermessen. Es ergibt sich eine Sättigungsmagnetisierung von ca. $3,1 \mu\text{rad}$ und eine Koerzitivfeldstärke von 8,8 Oe.

zitivfeldstärke beträgt bei diesem System $8,8 \pm 0,4$ Oe. Ein Vergleich mit den Messungen von Wu et al. [93] zeigt, daß sowohl die Sättigungsmagnetisierung als auch die Koerzitivfeldstärke mit den Ergebnissen seiner Messungen vergleichbar sind.

Das Ni- Signal ist als Untergrund bei der Interpretation der MOKE Ergebnisse für das Gesamtsystem zu berücksichtigen. Es ist außerdem aus den Messungen z.B. von Huang et al. [117] bekannt, daß die Curietemperatur eines 7 ML dicken Ni-Films bei 420 K liegt, d.h. der Ni-Film ist auch bei Raumtemperatur (300 K) ferromagnetisch.

Fe auf Ni/Cu(001)

In diesem Abschnitt werden die magnetischen Untersuchungen an dem System Fe auf 7 ML Ni auf Cu(001) vorgestellt. Da hier genau wie bei den strukturellen Untersuchungen an diesem System das Ziel ist, den Einfluß des ferromagnetischen Substrats Ni auf die beiden kfz- Phasen des Fe zu untersuchen, wurden die Messungen - ähnlich wie im vorherigen Abschnitt- auf einen Fe- Schichtdickenbereich bis 10 ML konzentriert. Ab dieser Schichtdicke geht das Fe-System in seine krz(110)-Phase über. Für den gesamten Schichtdickenbereich ab einer Fe-Schichtdicke von ca. 1,5 ML wurden MOKE- Messungen vorgenommen. Dazu wurde eine große Zahl verschiedener Messungen durchgeführt.

In Abb. 6.18 sind acht verschiedene für den gesamten Schichtdickenbereich charakteristische MOKE-Hysteresekurven dargestellt. Sie sollen einen ersten qualitativen Eindruck über den Magnetismus des Fe/Ni/Cu(001)- Systems geben. Außer für die Hysteresekurve der Fe-Schichtdicke von 9,91 ML sind für alle Graphen die gleichen X- und Y-Achsen gewählt. Damit ist gewährleistet, daß die verschiedenen Kurven direkt bzgl. ihrer Sättigungsmagnetisierung und ihres Hystereseverhaltens vergleichbar sind. Da die experimentellen Parameter jeweils so gewählt wurden, daß in einer minimalen Versuchszeit die Charakteristika der Hysteresekurven bestmöglichst aufgelöst wurden, unterscheiden sich dabei die meisten Kurven bzgl. der Dichte der gewählten Meßpunkte.

Bei der Betrachtung der Hysteresekurven ergeben sich eine Reihe von Übereinstimmungen zu Fe auf Cu(001). So erkennt man, wenn man sich auf die Magnetisierung konzentriert, genau wie für Fe auf Cu(001) drei verschiedene Bereiche in Abhängigkeit der Fe- Schichtdicke. Im ersten (1,76 und 2,36 ML) und im dritten Bereich (9,91 ML) ist dabei die Magnetisierung größer als im mittleren Bereich. Auch

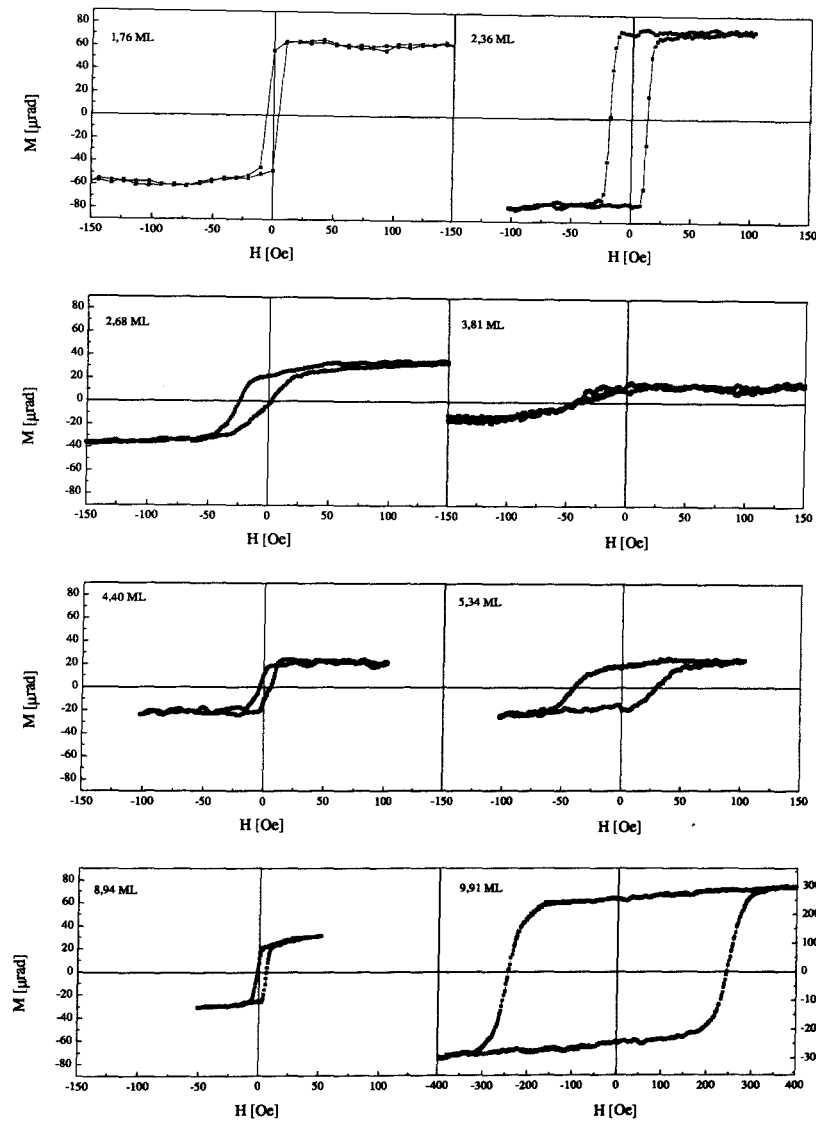


Abbildung 6.18: Acht verschiedene Hysteresekurven im Fe-Schichtdickenbereich von 1,76 bis 9,91 ML. Bis auf das Bild für den 9,91 ML Film wurde die identische Skalierung verwendet. Für die Schichtdicken 2,68 und 3,81 ML ergibt sich eine Verschiebung der Hysteresekurven gegen das äußere Feld.

für die Koerzitivfeldstärke (H_c) ergeben sich Übereinstimmungen. So findet man ein erhöhtes H_c im Bereich der Übergänge zwischen den drei Schichtdickenbereichen mit unterschiedlicher Sättigungsmagnetisierung (M_s).

Es zeigen sich aber auch schon bei diesen Hysteresekurven einige qualitative Unterschiede zum Fe/Cu(100)-System. So findet man für die beiden Schichtdicken 2,68 und 3,81 ML eine Verschiebung der Hysteresekurven gegen das äußere Feld. Eine solche Verschiebung wurde bei dem Fe/Cu(001)-System nie beobachtet. Man findet eine solche Verschiebung auch nur in Schichtsystemen, in denen eine Grenzflächen austauschanisotropie auftritt (Anhang A). Auch beobachtet man für eine Schichtdicke im Bereich konstanter Magnetisierung (5,34 ML) ein erhöhtes H_c und damit eine weitere Schichtdicke mit einem erhöhtem H_c . Auch dies ist von Fe/Cu(001) unbekannt. Hier sind nur zwei Bereiche bekannt.

Nach dieser qualitativen Beschreibung der Ergebnisse der MOKE-Messungen des Fe/Ni/Cu(001)-Systems ist in Abb. 6.19 eine quantitative Beschreibung gegeben. In dieser Abbildung sind M_s und H_c für das System Fe auf Ni/Cu(001) in Abhängigkeit von der Fe-Filmdicke aufgetragen. Diese Auftragung ist direkt mit der in Abb. 2.5 und den Ref. [16, 19] gezeigten vergleichbar.

Wie man es schon anhand der Hysteresekurven gesehen hatte, ergeben sich für die Sättigungsmagnetisierung in Abhängigkeit von der Fe-Schichtdicke drei verschiedene Bereiche. Der dritte beginnt ab einer Schichtdicke von ca. 9,7 ML. In diesem Bereich sind die magnetischen Eigenschaften identisch mit denen im gleichen Schichtdickenbereich von Fe/Cu(001). Oberhalb von 9,7 ML steigt die Magnetisierung stark an und übersteigt bei 10 ML 300 μrad . Das ist das gleiche Magnetisierungsniveau, das man auch bei Fe/Cu(001) findet. Auch beobachtet man im Übergangsbereich ein Maximum für die Koerzitivfeldstärke H_c . Oberhalb von 9,7 ML steigt H_c sprunghaft auf einen je nach Präparation verschiedenen Wert zwischen 270 und 300 Oe an, um dann wieder deutlich zu fallen. Bei dem Übergang zu dieser Phase zeigt es sich, daß, wie schon weiter oben erwähnt, die genaue Schichtdicke für die einzelnen Präparationen in Abhängigkeit von dem jeweiligem Restgasanteil variieren kann.

Im zweiten Schichtdickenbereich, der sich oberhalb von ca. 3 ML bis ca. 9,7 ML anschließt, ergibt sich eine annähernd konstante Magnetisierung. Sie liegt zwischen ca. 20 und 30 μrad und ist damit auf dem Niveau von ca. einer ML bei äquivalentem Moment wie in der ersten Phase. Auch ist das H_c in diesem Bereich weitgehend konstant auf einem niedrigen Niveau. Dies entspricht ungefähr dem Magnetismus, wie er von

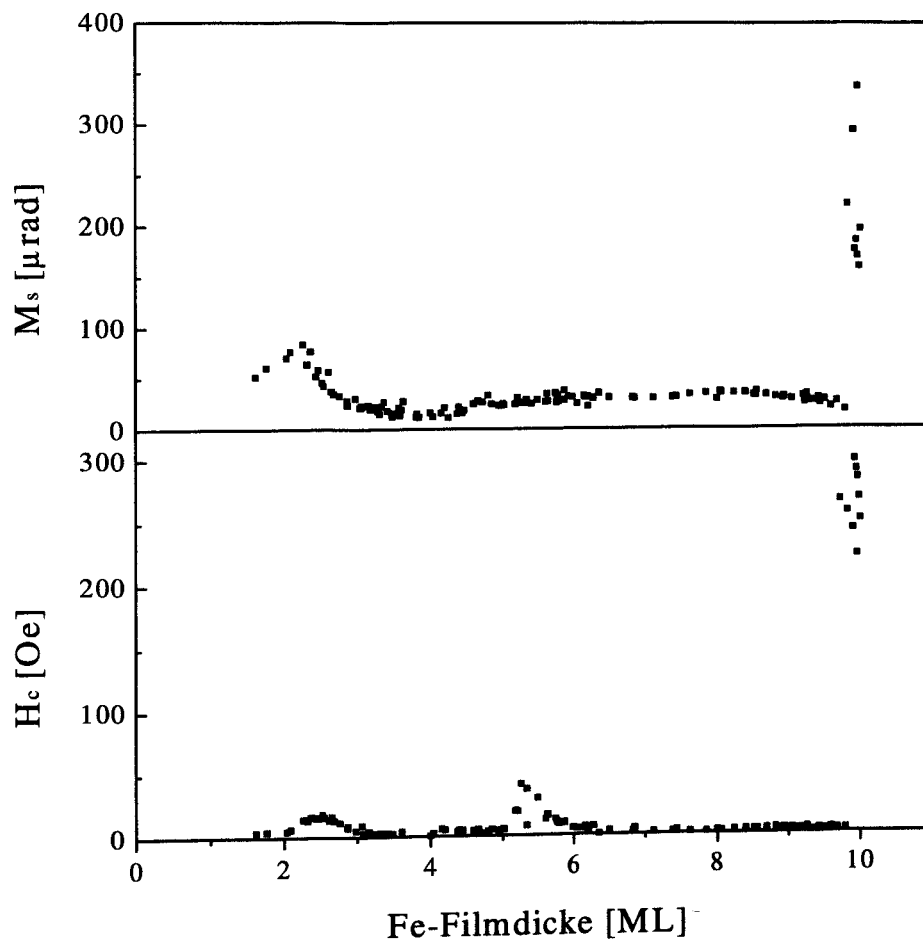


Abbildung 6.19: Magnetisierung (M_s) und Koerzitivfeldstärke (H_c) gegen die Fe-Schichtdicke. In dieser Auftragung erkennt man im oberen Diagramm im wesentlichen drei Bereiche. Man findet im Bereich bis zu ca. 2,4 ML einen linearen Anstieg der Magnetisierung. Im Bereich bis ca. 9,7 ML ist M_s im wesentlichen auf niedrigem Niveau konstant. Ab ca. 9,7 ML kommt es zu einem starken Anstieg von M_s . H_c ist im gesamten Bereich bis ca. 9,7 ML auf niedrigem Niveau von bis zu 10 Oe mit zwei Ausnahmen konstant. Es ergibt sich bei 2,7 ML ein H_c -Peak von ca. 20 Oe und bei 5,5 ML ein H_c -Peak von ca. 40 Oe. Oberhalb von 9,7 ML kommt es zuerst zu einem starken Anstieg auf 250 bis 300 Oe. Für größere Schichtdicken nimmt H_c wieder ab.

Fe auf Cu(001) bekannt ist. Gleichzeitig ergeben sich, wie wir an den Hysteresekurven gesehen haben, schon die ersten deutlichen Unterschiede. So findet man für Fe auf Cu(001) kein H_c -Maximum in diesem Bereich, wie hier bei ca. 5,5 ML. Auch beginnt der Bereich der konstanten Magnetisierung bei Fe/Cu(001) erst ab einer Schichtdicke von ca. 4,5 ML und das Magnetisierungsniveau ist etwas höher.

Im ersten Schichtdickenbereich gibt es weitere Übereinstimmungen zwischen den beiden Fe-Systemen. So findet man für Fe auf Ni/Cu(001) wie für Fe/Cu(001) einen linearen Anstieg der Magnetisierung. Dieser Anstieg erstreckt sich für Fe/Ni/Cu(001) bis zu einer Fe-Schichtdicke von ca. 2,4 ML. Aus der Magnetisierung bei 2,4 ML und einer Extrapolation zu null ML ergibt sich eine Steigung von $35,4 \pm 1,7 \mu\text{rad/ML}$ für den reinen Fe-Beitrag nach der Subtraktion des Ni-Anteils. Diesen Bereich der linearen Steigung findet man auch bei dem System Fe/Cu(100). Wobei man beim Vergleich mit dem Fe/Cu(100)-System allerdings berücksichtigen muß, daß bei gleicher Magnetisierung der polare Kerr-Effekt für Fe um einen Faktor 6,3 stärker ist als der longitudinale Kerr-Effekt [19, 43]. Hier findet B. Feldmann für die Steigung einen Wert von $235 \pm 15 \mu\text{rad}$ [16]. Daraus ergibt sich ein Verhältnis zwischen den beiden Geometrien von ca. $6,63 \pm 0,8$. Dieses entspricht innerhalb des Fehlers dem Faktor von 6,3, den Thomasen [19] unter Berücksichtigung der Geometrie der Realisierung beider Kerr-Effekte in diesem UHV-System für krz-Fe bestimmt hat, d.h. beide Phasen sind bzgl. ihrer Magnetisierung vergleichbar. Auch beobachtet man in Verknüpfung mit dem Magnetisierungsmaximum ein weiteres H_c -Maximum.

Damit ergeben sich für Fe auf Ni/Cu(001) insgesamt drei H_c -Maxima. Von diesen drei Maxima sind das erste und das dritte direkt durch eine Übertragung der Eigenschaften des Systems Fe/Cu(001) auf das System Fe/Ni/Cu(001) zu verstehen. Beide sind mit den Phasenübergängen verknüpft. Dieses wird weiter unten in der Diskussion genauer betrachtet. Auffällig ist aber die geringe Schichtdicke bei der der erste magnetische Phasenübergang stattfindet. Es bietet sich daher an, die erste und die zweite magnetische Phase genauer zu betrachten. Dazu ist es allerdings sinnvoll eine Auftragung zu wählen, bei der nur Schichten bis 9,7 ML berücksichtigt werden.

Eine solche ist in Abb. 6.20 gezeigt, wobei hier allerdings noch zusätzlich die Verschiebung der Hysteresekurve gegen $H=0$ aufgetragen wurde, wie sie in Abb. 6.18 z.B. für den 3,81 ML dicken Film klar erkennbar war. Diese Verschiebung wird in Analogie zu dem sogenannten Exchange bias-Feld (Anhang A) mit H_f bezeichnet. Bei der Betrachtung der M_s -Kurve stellt man fest, daß der Bereich zwischen 2,7 und 9,7 ML kein

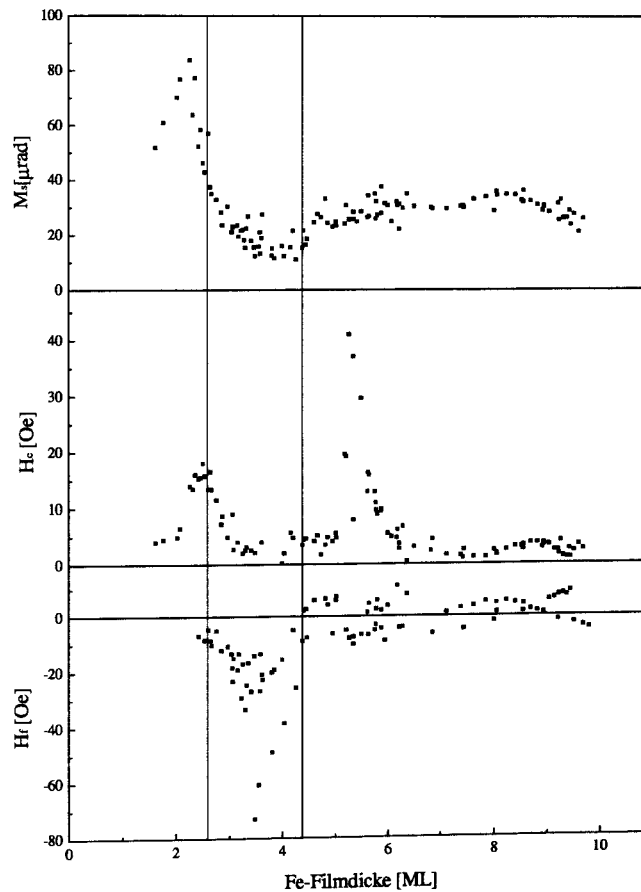


Abbildung 6.20: Magnetisierung (M_s), Koerzitivfeldstärke (H_c) und Austauschisotropiefeld (H_f) gegen Fe- Filmdicke. Zwischen 3,2 und 4,6 ML liegt das Niveau für M_s tiefer als im Schichtdickenbereich zwischen 4,6 und 9,7 ML.

einheitliches Verhalten zeigt. Zwischen 2,7 und ca. 3,5 ML fällt M_s auf ein Niveau, daß deutlich von dem Niveau der 6 oder 8 ML Schichten verschieden ist. M_s steigt erst ab einer Schichtdicke um 4,4 ML wieder an, um im Bereich zwischen 6 und 9 ML relativ konstant zu verlaufen. Oberhalb von 9 ML ist wieder ein leichter aber deutlicher Abfall von M_s zu erkennen. Das Niveau zwischen 3,5 und 4,4 ML liegt bei ca. $15 \mu\text{rad}$ und ist damit nur ca. halb so groß wie die Magnetisierung einer ML in der ersten Phase. Der Vergleich der M_s - mit der H_c - Kurve zeigt, daß das erste H_c - Maximum in der

Fe- Schichtdicke etwas gegen das M_s - Maximum verschoben ist und im Bereich des stärksten Abfalls vom M_s liegt. Das zweite H_c - Maximum liegt mit einer Fe- Filmdicke von 5,5 ML hingegen in einem Bereich in dem M_s nur noch leicht gegen das Niveau des 6 ML-Films von $30 \mu\text{rad}$ ansteigt. H_f ist erst in einem Bereich oberhalb von ca. 2,4 ML ungleich Null. Man kann hier zwei verschiedene Bereiche erkennen. Im ersten Bereich bis ca. 4,3 ML gibt es ein ausgeprägtes Minimum bei ca. 3,3 ML. Dieses Minimum ist für die verschiedenen Präparationen unterschiedlich stark ausgeprägt. So variiert die Amplitude zwischen 20 und 75 Oe. Die Position des Minimums variiert hingegen nur um $\pm 0,15$ ML. Im zweiten Bereich zwischen 4,3 und 9,7 ML ist die maximale Amplitude hingegen nur ca. 10 Oe und man findet hier im Bereich zwischen 5 und 6,4 ML eine Region, in dem das Vorzeichen der Verschiebung unklar ist, so daß sich der Eindruck einer Variation um die Nulllinie ergibt.

Ein Vergleich von H_f mit M_s zeigt, daß der Bereich des stärksten H_f mit dem Übergang zwischen dem ersten und dem zweiten Magnetisierungsbereich übereinstimmt. Auch ein Vergleich von H_c und H_f zeigt ein interessantes Detail: So findet man das zweite H_c - Maximum bei der Fe-Schichtdicke, für die das Vorzeichen des H_f nicht eindeutig ist.

Damit ergeben sich zwei Bereiche, die besonders interessant sind: Der erste Bereich liegt beim H_f - Minimum um ca. 3,3 ML und der zweite Bereich bei 5,3 ML am zweiten H_c -Maximum. Um diese beiden Bereiche genauer untersuchen zu können, wurden Messungen in Abhängigkeit von der Temperatur vorgenommen.

Als erstes wurde der 5,3 ML Film untersucht. Diese Schichtdicke ist von doppeltem Interesse. Zum einen hat man so die Möglichkeit die hohe Koerzitivfeldstärke in diesem Schichtdickenbereich besser zu untersuchen. Außerdem ergibt sich die Gelegenheit nach der Ursache für das niedrige Magnetisierungsniveau im zweiten Schichtdickenbereich zu forschen.

Wie in Abb. 6.21 dargestellt ist, ergeben sich dabei vier verschiedene Temperaturbereiche. Im ersten ist M_s für tiefe Temperaturen bis zu ca. 210 K näherungsweise konstant auf einem Niveau von ca. $25 \mu\text{rad}$. Danach fällt M_s im zweiten Temperaturbereich (210 bis 230 K) sehr stark ab bis auf $9 \mu\text{rad}$, um dann bei einer Temperatur von 240 K auf $36 \mu\text{rad}$ anzusteigen. In dem dritten Temperaturbereich über 240 K fällt M_s bis zu einer Temperatur von ca. 275 K ab, um sich darüber wieder zu stabilisieren (vierter Temperaturbereich). Da es bei der Temperatur von 240 K zu einer sprunghaften Änderung der magnetischen Eigenschaften kommt, erkennt man auch daran,

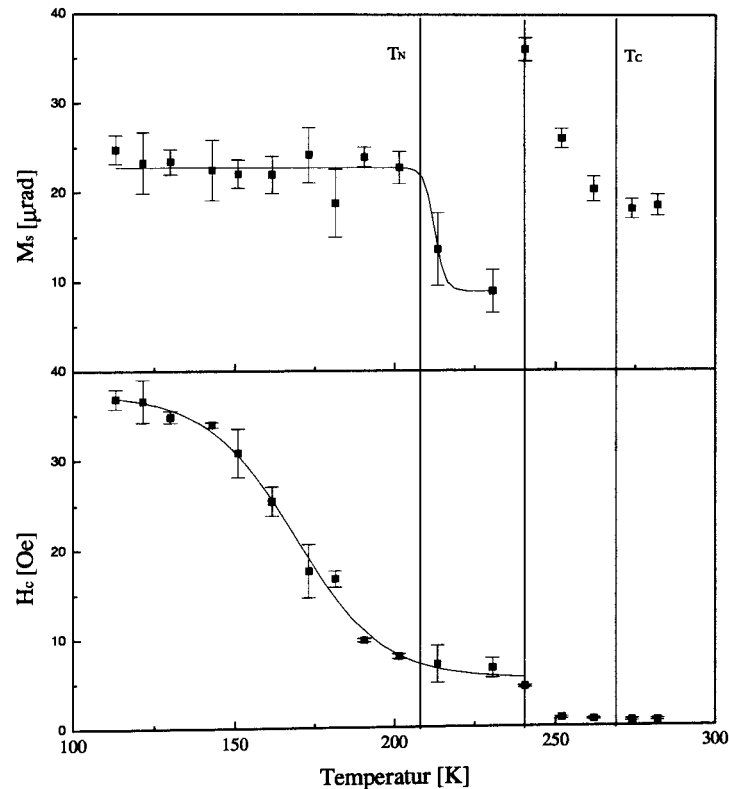


Abbildung 6.21: Magnetisierung und Koerzitivfeldstärke für einen 5,5 ML dicken Fe-Film in Abhängigkeit von der Temperatur. Sowohl für die Magnetisierungskurve als auch für die H_c -Kurve erkennt man verschiedene Temperaturbereiche. Besonders auffällig ist, daß um 240 K in beiden Kurven ein Sprung auftritt. T_N ist die Néeltemperatur von antiferromagnetischem kfz-Fe und T_c die Curietemperatur der ferromagnetischen Oberflächenschicht.

daß es auch im gleichen Temperaturbereich zu einer sprunghaften Änderung von H_c kommt. Unterhalb dieser Temperatur haben wir eine kontinuierliche Abnahme von H_c , die allerdings ab einer Temperatur von ca. 200 K immer schwächer wird. Oberhalb von 250 K ist H_c auf einem Niveau von ca. 1 Oe konstant.

Bei der Betrachtung von H_c sollte berücksichtigt werden, daß diese Größe mit der mikromagnetischen Struktur gekoppelt ist. Der Eindruck, daß es sich hier um eine

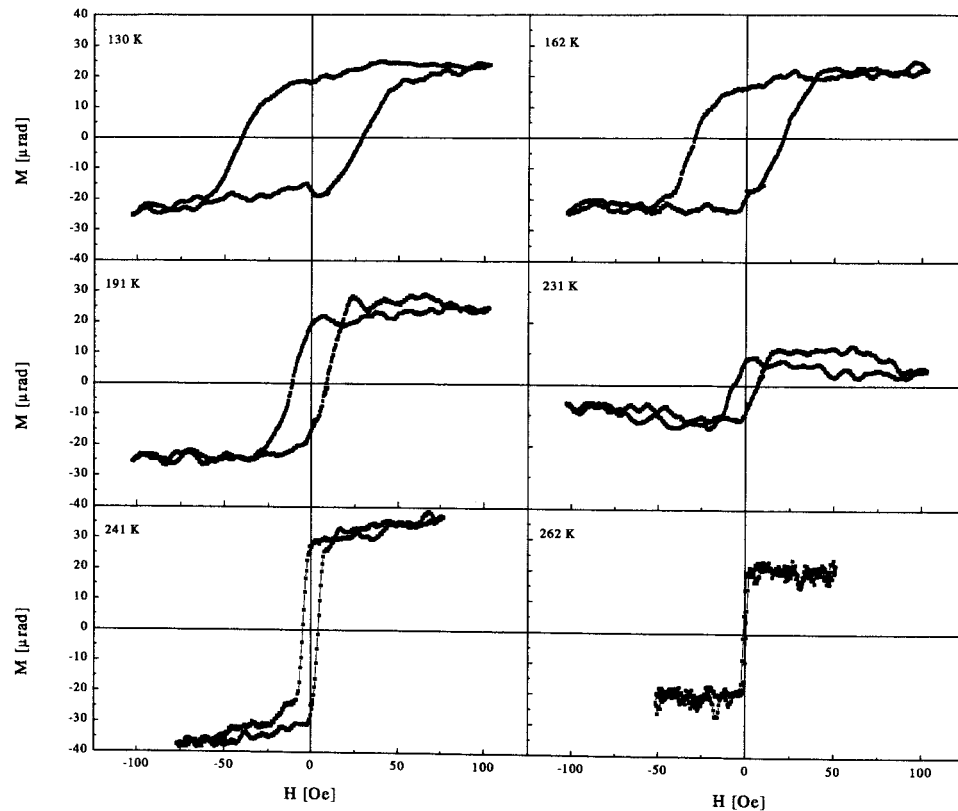


Abbildung 6.22: Hysteresekurven im Temperaturbereich von 130 bis 260 K für den 5,3 ML dicken Fe-Film. Sie geben einen Überblick über die verschiedenen in Abb. 6.21 für H_c und M_s erkennbaren Bereiche.

sprunghafte Änderung des magnetischen Zustandes handelt, wird durch die Hysteresekurven in Abb. 6.22, die zu den in Abb. 6.21 gezeigten Meßpunkten gehören, verstärkt. Hierbei erkennt man, daß die Hysteresekurven bei 130 und 160 K dem Verlauf der Kurve für 5,34 ML in Abb. 6.21 sehr ähnlich sind. Dabei ist zu beachten, daß für die 130 K Kurve H_c schon leicht und für die 160 K Kurve schon deutlich von der Kurve aus Abb. 6.18 verschieden ist. Bei einer Temperatur von 190 K ist H_c schon auf ca. 10 Oe zurückgegangen. Während die drei ersten Kurven annähernd das gleiche M_s haben, ist für die Kurve bei 230 K die Amplitude doch deutlich kleiner. Insbesondere zeigt sich hier ein schlechtes Signal zu Rausch-Verhältnis. Im Kontrast dazu hat die Kurve

bei 240 K ein sehr viel besseres Signal zu Rausch-Verhältnis in Verbindung mit einem deutlich höheren M_s . Bei dieser Temperatur ist weiterhin eine deutliche Hysterese mit einem Koerzitivfeld (H_c) von 4 Oe zu erkennen. Bei 260 K ist diese Hysterese fast verschwunden und auch M_s ist auf einen Wert von ca. $18 \mu\text{rad}$ zurückgegangen. Diese Kurven reflektieren qualitativ sehr schön das in Abb. 6.21 quantitativ gezeigte Verhalten.

Ein ganz anderes Verhalten wird für den 3,2 ML dicken Fe- Film in Abhängigkeit von

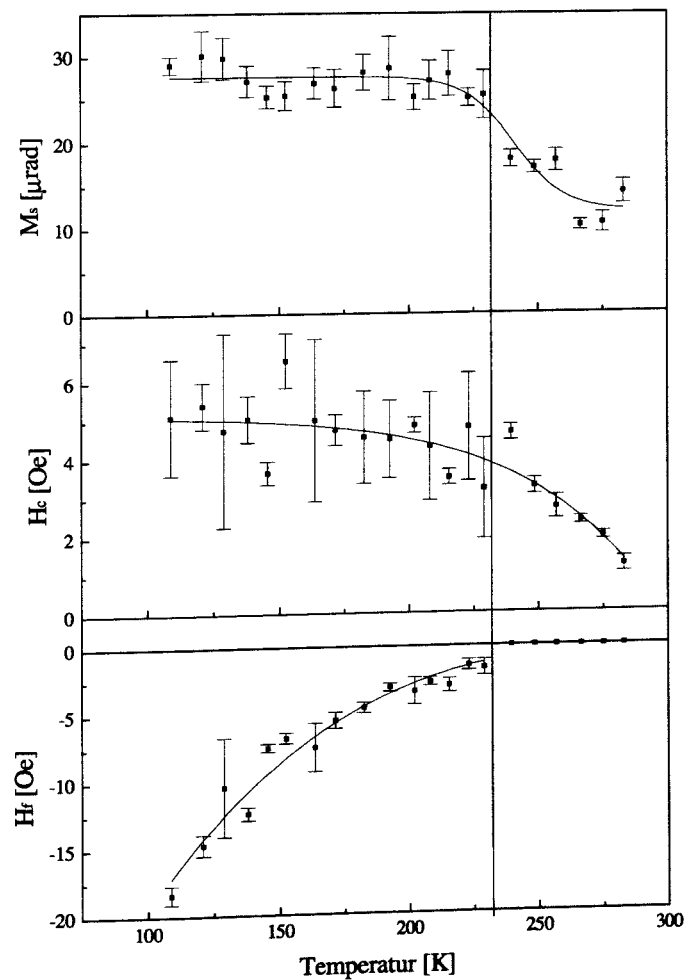


Abbildung 6.23: Magnetisierung (M_s), Koerzitivfeldstärke (H_c) und Austausch-anisotropiefeld (H_f) für eine 3,2 ML Fe- Schicht in Abhängigkeit von der Temperatur.

der Temperatur beobachtet (siehe Abb. 6.23). Hierbei zeigt sich, daß M_s im gesamten Temperaturbereich fällt, wobei man zwischen zwei Bereichen unterscheiden kann. Im ersten bis ca. 220 K fällt M_s nur sehr leicht. Im zweiten Bereich (≥ 220 K) fällt M_s hingegen stark ab. H_c fällt im gesamten Temperaturbereich ab, wobei zwar keine verschiedenen Bereiche unterschieden werden können, aber der Gradient des Abfalls nimmt kontinuierlich zu. Für H_f hingegen ergeben sich wiederum zwei verschiedene Bereiche. Im ersten Bereich bis ca. 230 K nimmt H_f kontinuierlich zu, wobei der Gradient der Zunahme kontinuierlich abnimmt. Dieses Temperaturverhalten entspricht den neueren Ergebnissen für Systeme mit Austauschisotropiefeld [98, 99]. Frühere Untersuchungen haben einen eher linearen Anstieg gefunden. Im zweiten Temperatur-

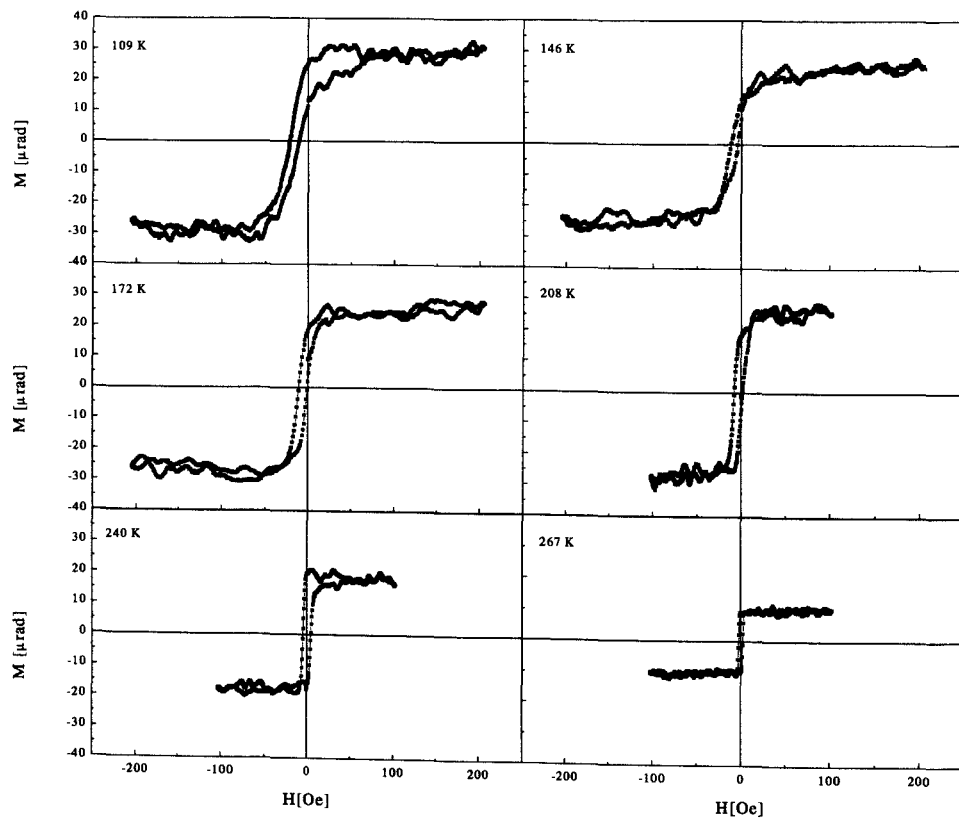


Abbildung 6.24: Verschiedene Hysteresekurven zu den in Abb. 6.23 dargestellten Messungen für einen 3,2 ML dicken Fe-Film.

bereich ist H_f exakt Null. Dieser Übergang ergibt sich bei 230 K sprunghaft. Um einen noch besseren Eindruck von diesem Temperaturverhalten zu geben, sind in Abb. 6.24 verschiedene Hysteresekurven angegeben, die zu den in Abb. 6.23 gezeigten Meßpunkten gehören.

Bei der Untersuchung der Struktur hatte sich gezeigt, daß der Fe- Schichtdickenbereich zwischen 2,5 und 4,3 ML für das System Fe/Ni/Cu(001) im Vergleich zum System Fe/Cu(001) eine modifizierte Struktur hat. Es konnte dabei allerdings nicht vollständig geklärt werden, wie groß der Einfluß der größeren Rauhigkeit der Grenzfläche ist. Da die magnetischen Studien für diesen Schichtdickenbereich auch eine Modifizierung der magnetischen Eigenschaften gezeigt hat (H_f , reduziertes M_s), bietet es sich an den Einfluß der Grenzflächenrauheit auf diese Veränderungen zu testen. Dazu wurde ein Ni- Keil untersucht, der für die Dauer von 10 Minuten bei einer Temperatur von 380 K getempert wurde. Aus den strukturellen Untersuchungen (siehe dazu Abschnitt 6.2 bzw. Ref.[91]) war bekannt, daß ein solches Tempern zu einer Glättung des Ni-Films führt.

In Abb. 6.25 sind M_s , H_c und H_f für den Schichtdickenbereich zwischen 2,4 und 3,4 ML aufgetragen. Für diese drei Größen sind drei verschiedenen Messungen dargestellt. Die ausgefüllten Quadrate zeigen die Messung bei 110 K. Die ausgefüllten Kreise zeigen eine Messung bei 300 K, die direkt nach der Präparation vor dem ersten Einkühlen aufgenommen wurde und die offenen Kreise zeigen eine Messung bei 300 K, die nach dem Einkühlen aufgenommen wurde.

Ein Vergleich der Sättigungsmagnetisierung der Tieftemperaturmessung mit den Werten aus Abb. 6.20 zeigt, daß das M_s für die nicht geheizte Probe um durchschnittlich 5 bis 10 μrad geringer ist, der Abfall von M_s mit der Schichtdicke für beide Systeme aber sehr gut übereinstimmt. Dieses findet man auch für die Abhängigkeit von Koerzitivfeldstärke und Austauschanisotropiefeld von der Fe-Schichtdicke, wobei bei dieser Messung allerdings das Vorzeichen des H_f verschieden von dem Vorzeichen des H_f im vergleichbaren Schichtdickenbereich in Abb. 6.20 ist.

Das Tempern des Ni-Films hat also keinen wesentlichen Einfluß auf die magnetischen Eigenschaften des Fe/Ni/Cu(001)-Systems im Schichtdickenbereich von 2,5 bis 3,5 ML. Weder verschwindet das H_f (es wird nur modifiziert) noch ergibt sich eine Änderung im Übergangsbereich der Magnetisierung.

Auch die Abhängigkeit von H_c von der Fe- Schichtdicke stimmt für beide Messungen überein und entspricht dem aus Abb. 6.23 erwarteten Wert und Verhalten. H_c

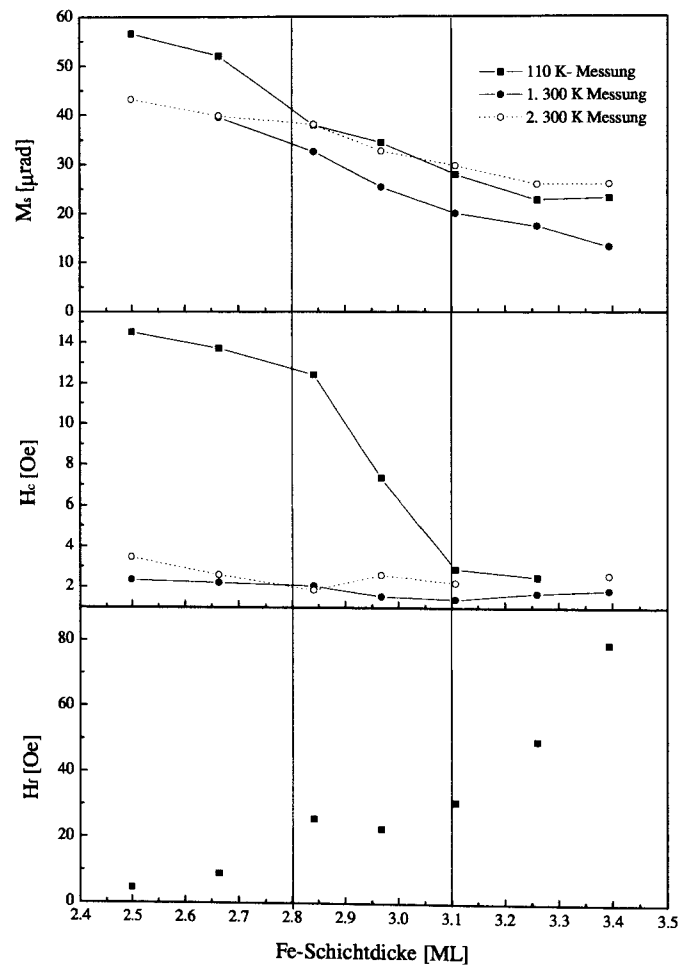


Abbildung 6.25: Sättigungsmagnetisierung (M_s), Koerzitivfeldstärke (H_c) und Austauschanisotropiefeld (H_f) in Abhängigkeit von der Fe- Schichtdicke. Bei der Herstellung des Schichtsystems wurde, bevor der Fe-Keil aufgedampft wurde, die Probe für 10 min bei 380 K getempert. Es ergeben sich nur im Detail Unterschiede zum nicht getemperten System.

bewegt sich für beide (300K)- Untersuchungen im gesamten Schichtdickenbereich zwischen 1 und 4 Oe. Bei der Betrachtung von M_s zeigt sich eine komplexere Situation. Für die Raumtemperaturmessung (300 K), die vor dem Einkühlen vorgenommen wurde, ist das Niveau von M_s im gesamten Schichtdickenbereich zwischen 5 und 10 μrad kleiner als bei der Tieftemperaturmessung. Dieses entspricht den Erwartungen aus der temperaturabhängigen Messung (Abb. 6.23). Auf diesem tieferen Niveau der Sättigungsmagnetisierung befindet sich auch die nach dem ersten Einkühlen aufgenommene 300 K Messung für den Schichtdickenbereich bis 2,7 ML. Im Bereich zwischen 2,8 und 3,1 ML liegt M_s für diese Messung allerdings auf dem Niveau der Tieftemperaturmessung. Deren Niveau wird ab ca. 3,1 ML bis 3,4 ML überschritten.

Neben den Untersuchungen des Übergangs von Phase I nach Phase II ist auch der Übergang von Phase II nach Phase III (krz- Phase) von Interesse bei der Deutung des Einflusses der Ni- Schicht. Verschiedene Untersuchungen an dem System Fe/Cu(001) haben gezeigt, daß die Phase II aus thermodynamischer Sicht metastabil gegenüber einer Umwandlung in die krz- Phase ist. Dazu wurden verschiedene Untersuchungen vorgenommen. So zeigen z.B. RTM- Untersuchungen, daß bei einem bei 300 K präparierten Film schon ab einer Fe-Filmdicke von 4,6 ML die ersten Versetzungen zu erkennen sind, die ein Vorzeichen für einen Phasenübergang in die krz-Phase darstellen [29]. Andere Untersuchungen zeigen, daß durch Kühlen oder Heizen die Umwandlung in die krz- Phase beschleunigt werden kann [27]. Daher wurde für das Fe/Ni/Cu(001)- System ebenfalls ein Versuch durchgeführt, um die thermodynamische Instabilität zu testen. Dazu wurde das System erst gekühlt und danach wieder auf 300 K erwärmt. Um die beiden Phasen unterscheiden zu können, wurde dann der für beide Systeme unterschiedliche Magnetismus als Kenngröße verwendet.

Es wurde dabei der Bereich zwischen 5,7 und 10 ML untersucht. Die Abhängigkeit von M_s und H_c von der Fe-Schichtdicke ist in Abb. 6.26 dargestellt. Die gefüllten Quadrate stehen für die Tieftemperaturmessungen und die offenen Kreise für die Raumtemperaturmessungen. Die Ergebnisse der Tieftemperaturmessungen für M_s und H_c entsprechen den in Abb. 6.19 gezeigten Ergebnissen. Man findet ab ca. 9,9 ML einen scharfen Übergang von Phase II nach Phase III, der sich in einer starken Zunahme von H_c und M_s äußert. Für die 300 K-Messungen findet man bis zu einer Schichtdicke von ca. 8 ML die typische Abhängigkeit von M_s und H_c von der Fe-Schichtdicke, wobei H_c allerdings schon ab ca. 6,5 ML von 1,5 Oe auf 7 Oe bei 8 ML ansteigt. M_s ist in diesem Schichtdickenbereich ca. 5 bis 10 μrad kleiner als bei den 110 K-Messungen. Oberhalb dieser

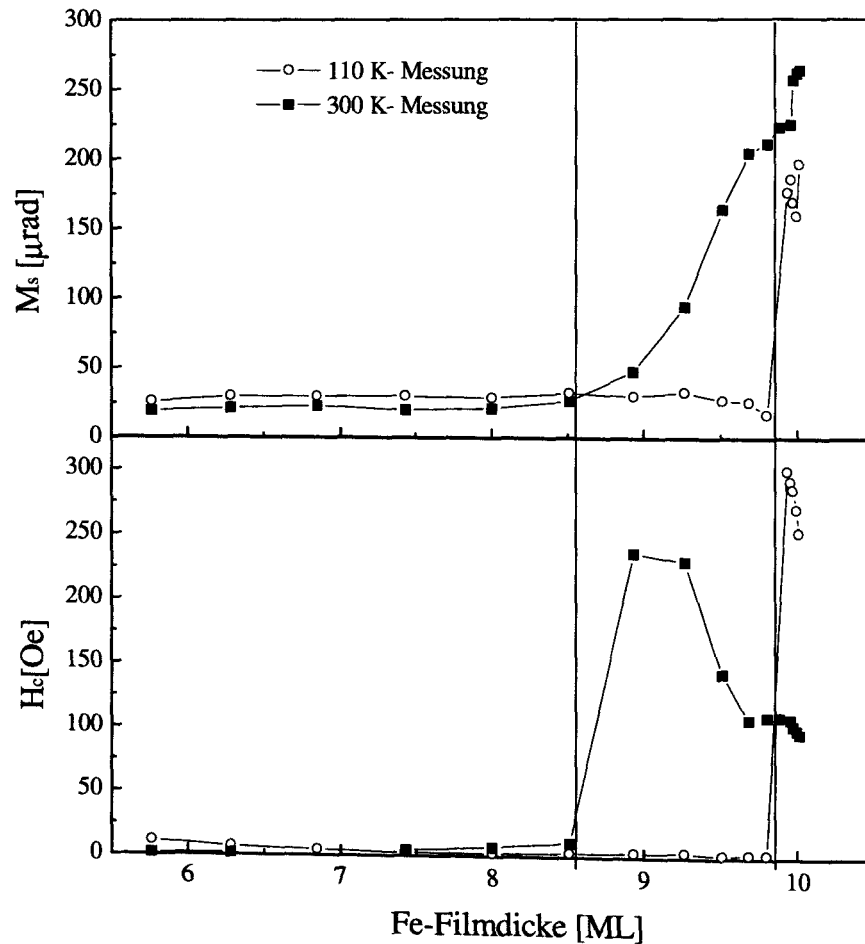


Abbildung 6.26: Untersuchung des Übergangs der kfz- zur krz- Struktur. Das obere Diagramm zeigt M_s in Abhängigkeit von der Fe-Schichtdicke im Bereich zwischen 5,7 und 10 ML. Die gefüllten Quadrate stellen die Messung bei 110 K und die offenen Kreise die Messungen bei 300 K dar. Im unteren Diagramm ist für die gleichen Messungen H_c in Abhängigkeit von der Fe-Schichtdicke dargestellt. Bedingt durch eine thermisch aktivierte Umwandlung findet man für die 300 K-Messungen ab einer Schichtdicke von 8,5 ML den einsetzenden Übergang zur krz(110)-Phase.

Fe-Schichtdicke findet man allerdings einen deutlichen und immer stärker werdenden Anstieg von M_s bis zu einem Wert von ca. $220 \mu\text{rad}$ bei 9,90 ML Fe. Für H_c ergibt sich im Fe-Schichtdickenbereich zwischen 8 und 9,9 ML ein Maximum. Dieses wird zwischen 8,9 und 9,3 ML im Bereich des stärksten M_s -Anstiegs erreicht und hat einen maximalen Wert von 235 Oe, der damit deutlich niedriger liegt als das H_c -Maximum bei den Tieftemperaturmessungen, das 300 Oe erreicht. Oberhalb dieses Maximums fällt H_c stark ab und erreicht bei 9,9 ML einen Wert von ca. 110 Oe. Oberhalb von 9,9 ML, der Schichtdicke bei der für die Tieftemperaturmessungen der Phasenübergang gefunden wurde, findet man einen nochmaligen leichten sprunghaften Anstieg von M_s auf ein Niveau von $260 \mu\text{rad}$. Für H_c findet man einen leichten weiteren Abfall auf 100 Oe. Allerdings beschreibt sowohl M_s als auch H_c die Veränderungen im Schichtdickenbereich zwischen 8,5 und 10 ML nur unzureichend. Daher sind in Abb. 6.27 für verschiedene Schichtdicken die Hysteresekurven der 300 K-Messung aufgetragen.

Hierbei zeigt sich, daß es schon ab einer Schichtdicke von ca. 7,4 ML einzelne Domänen in der Schicht mit einem von der Phase II verschiedenen magnetischen Verhalten gibt, obwohl hier H_c mit 4,6 Oe einen noch sehr geringen Wert hat. Dieses wird bis zu einer Schichtdicke von 8,5 ML immer deutlicher, so daß für Fe-Schichtdicken von 8,5 bis 9,7 ML Hysteresekurven vorliegen. Die Hysteresekurven zeigen deutlich, daß der Fe-Film aus zwei Phasen besteht. Oberhalb dieser Schichtdicke werden die Kurven mit zunehmender Schichtdicke wieder rechteckiger und zeigen damit das typische Aussehen von Proben, die aus einer magnetischen Phase bestehen [100]. Dieses ergibt sich z.B. für die 9,8 ML dicken Fe-Filme. Ein Anstieg von H_c ist für den Übergang von der kfz-Struktur der Phase II zu der krz-Struktur der Phase III für das System Fe/Cu(100) typisch, wie in verschiedenen Arbeiten zu diesem System gezeigt [20, 30]. Der Anstieg von H_c wurde in einer Arbeit von Berger et al. [30] anhand eines Modells gedeutet, das von einem Pinnen der Domänenwände an die Phase mit der geringeren Freien Energie ausgeht. Außerdem ist das MOKE-Signal der krz-Phase größer als das der kfz-Phase II, da es sich bei der krz-Phase um eine homogen ferromagnetisch magnetisierte Phase handelt. Es ist also insgesamt sowohl mit einem Anstieg von M_s und auch von H_c zu rechnen, falls Teilvolumen des Fe-Films in die krz-Phase umgewandelt werden.

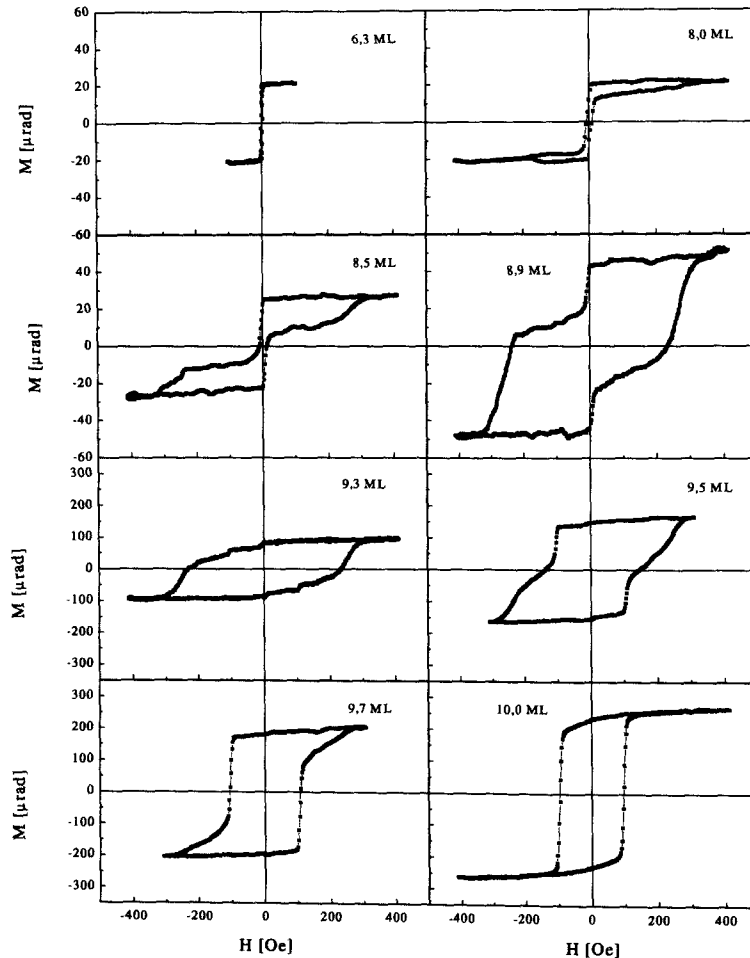


Abbildung 6.27: Hysteresekurven für die in Abb. 6.26 dargestellte 300 K Messung im Schichtdickenbereich von 6,3 bis 10 ML.

6.3.2 Einordnung und Diskussion

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für Fe/Ni/Cu(001), die im vorherigen Abschnitt gezeigt wurden, vor dem Hintergrund der Ergebnisse der Studien für Fe auf Cu(001) diskutiert. Dazu werden auch die Ergebnisse anderer Studien zu den Systemen Fe auf Co/Cu(100), Fe/Ni/Cu(100) zum Vergleich herangezogen. Im Anschluß werden die Ergebnisse im Hinblick auf die Fragestellung dieser Arbeit und ihre Bedeu-

tung im Gesamtkontext eingeordnet.

Eine einfache Möglichkeit des Vergleichs zwischen dem Fe/Cu(100) und dem Fe/Ni/Cu(001)-System ist der direkte Vergleich der Schichtdickenabhängigkeit der Sättigungsmagnetisierung. Wie im vorherigen Abschnitt schon erwähnt, ist dies nicht möglich, da die kfz Fe-Phasen auf Cu eine senkrechte Magnetisierung und die kfz Fe-Phasen beim Wachstum auf Ni/Cu(100) eine in der Oberflächenebene liegende Magnetisierung zeigen. Die senkrechte Magnetisierung kann man nur mit dem polaren und die parallele Magnetisierung mit dem longitudinalen Kerr-Effekt messen. Diese beiden Geometrien zeigen allerdings für Fe eine um den Faktor 6,3 unterschiedliche Sensitivität. Dies führt dazu, daß man die Magnetisierung eines der beiden Systeme für eine angemessene Darstellung entsprechend reskalieren muß.

Eine Auftragung, die den direkten Vergleich der kfz-Phasen des Fe/Cu(001)- und des Fe/Ni/Cu(001)-Systems gestattet, ist im oberen Diagramm in der Abb. 6.28 gewählt. Man erkennt für beide Systeme sehr gut, daß in einem ersten Schichtdickenbereich M_s linear mit der Schichtdicke steigt, wobei allerdings die Schichtdicke, bis zu der diese lineare Steigung beobachtet wird, deutlich verschieden ist. Im Schichtdickenbereich zwischen 2,4 und 4,5 ML ist das Niveau von M_s für beide Systeme stark unterschiedlich. Ab dieser Schichtdicke zeigen beide Systeme ein annähernd konstantes M_s , wobei sich allerdings das Magnetisierungsniveau für beide Systeme deutlich unterscheidet. Die Magnetisierung ist für das Fe/Cu(001)-System im Durchschnitt um ca. ein Drittel größer als für das Fe/Ni/Cu(001)-System. Aus der Steigung der Magnetisierung in der ersten Phase kann man eine Magnetisierung pro Atomlage bestimmen. Wenn man die Reskalierung beim Übergang vom longitudinalen zum polaren Kerr-Effekt mitberücksichtigt, ergibt sich dabei für Fe/Cu(100) ein Wert von $235 \pm 15 \mu\text{rad/ML}$ [16] und für das System Fe/Ni/Cu(001) ein Wert von $223 \pm 11 \mu\text{rad/ML}$. Diese beiden Werte sind also innerhalb der Fehlergenauigkeit gleich.

Wenn man mit diesen Werten das M_s -Niveau im Schichtdickenbereich zwischen 4,5 und 10 ML normiert, erhält man für das Fe/Cu(100)-System einen Wert von ca. 1,3 ML und für das System Fe/Ni/Cu(100) einen Wert von ca. 0,9 ML. Es tritt im Vergleich dieser Systeme doch ein deutlicher Unterschied in der Gesamtmagnetisierung im Schichtdickenbereich zwischen 4,5 und 10 ML auf, wobei der fast konstant bleibende Verlauf vergleichbar ist.

Um die Unterschiede in den M_s -Kurven besser mit den strukturellen und magnetischen Besonderheiten des Fe/Ni/Cu(100)-Systems vergleichen zu können, wurden hier

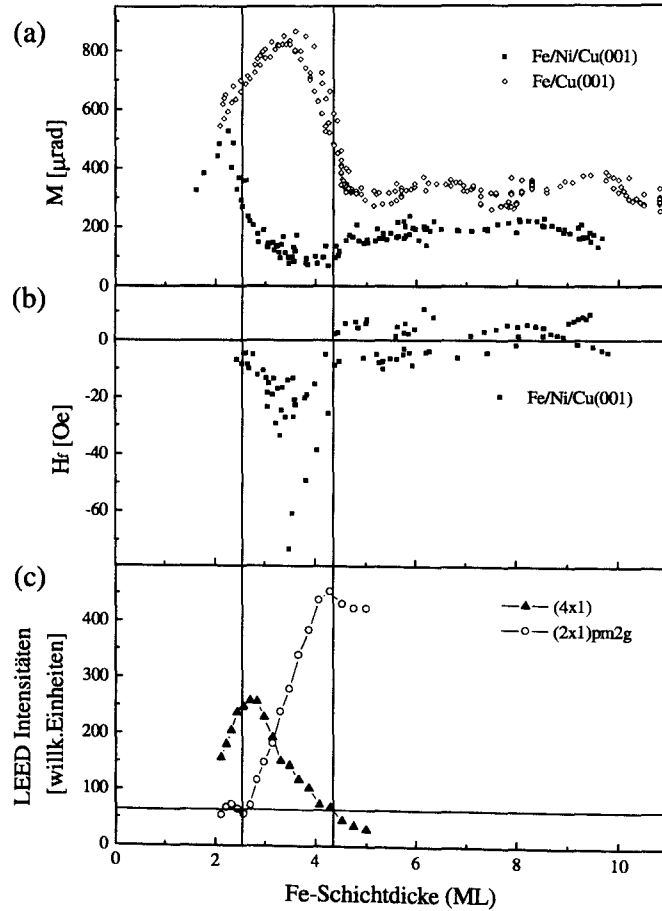


Abbildung 6.28: (a) Vergleich der Sättigungsmagnetisierung (M_s) der Systeme Fe/Cu(100) und Fe/Ni/Cu(001) in Abhängigkeit der Fe- Schichtdicke. Die Kurve für das Fe/NiCu- System wurde mit dem Faktor 6,3 reskaliert (im Vergleich zur Abb. 6.20). (b) und (c) zeigen zum Vergleich die H_f -Kurve aus Abb. 6.20 und die LEED- Überstrukturintensitätskurven aus Abb. 6.7. Die beiden Linien beschränken die Schichtdicke, bei der der Übergang zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g-Struktur stattfindet. Es ergeben sich im Bereich des Übergangs zwischen den beiden Strukturen deutliche Unterschiede in der Sättigungsmagnetisierung. Im Bereich zwischen 4,5 und 10 ML liegt das M_s Niveau des Fe/Ni/Cu- Systems deutlich unter dem des Fe/Cu- Systems.

zusätzlich H_f und die LEED -Überstrukturintensität gegen die Filmdicke wie in den Abb. 6.20 und 6.7 aufgetragen. Dabei zeigt sich, daß der Bereich des strukturellen Phasenübergangs zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g-Struktur identisch ist mit dem Bereich des Minimums im H_f . Weiterhin ist er identisch mit dem Bereich bei dem die Magnetisierung für die beiden unterschiedlichen Systeme (Fe/Cu(001) und Fe/Ni/Cu(001)) stark unterschiedlich ist. Es ist daher anzunehmen, daß das Auftreten des breiten strukturellen Übergangs zwischen den beiden kfz-Phasen mit dem besonders ausgeprägtem Auftreten von H_f in diesem Bereich verknüpft ist.

Bei einem einfachen Modell für den magnetischen Übergang zwischen den beiden Phasen, kann man, wenn man den Verlauf der Überstrukturintensitäten mit der Fe-Filmdicke betrachtet, davon ausgehen, daß während des Übergangs das Volumen der zweiten Phase linear mit der Schichtdicke ansteigt. Auch sollte man annehmen, daß sich die Magnetisierungen beider Strukturen addieren. Ein solches Modell ist in Abb. 6.29 in dem oberen Graphen dargestellt (durchgezogene Linie). Wobei im ersten Bereich eine Steigung von $36,7 \mu\text{rad/ML}$ und im zweiten das M_s des 8,5 ML Films als Größe gewählt wurde. Im Vergleich dazu wurde die M_s -Kurve für das Fe/Ni/Cu(001)-System gestrichelt eingetragen. Man erkennt, daß es zwischen diesem einfachen Modell und der realen Kurve deutliche Differenzen gibt. Diese Differenz ist als gepunktete Kurve ebenfalls eingetragen. Die Differenzkurve hat ein breites Maximum zwischen 2,5 und 4 ML.

Dieser Vergleich zeigt, daß es noch zusätzlicher Effekte bedarf, um das ausgeprägte Minimum von M_s in dem Schichtdickenbereich zwischen 3 und 4,5 ML zu erklären.

Ein Ansatz dazu ist ein Modell, bei dem die beiden verschiedenen strukturellen Phasen in diesem Bereich antiferromagnetisch koppeln. Dieses hätte zur Folge, daß sich als die resultierende Magnetisierung der Betrag der Differenz der Magnetisierung der beiden verschiedenen Phasen ergibt. Dieses Modell ist im unteren Diagramm in Abb. 6.29 dargestellt. Ein solches Modell würde das asymmetrische Minimum von M_s bzgl. der beiden Grenzen des Übergangsbereichs erklären. Allerdings sind die Abweichungen zwischen Experiment und Modell auch hier noch groß.

Um die Tragfähigkeit dieses Modells zu testen, muß die Frage geklärt werden, wie es zu einer solchen Kopplung kommen kann und inwieweit mit diesem Modell die verschiedenen beobachteten magnetischen und strukturellen Erscheinungen erklärt werden können bzw. im Einklang stehen. Eine dieser Erscheinungen ist das Auftreten des H_f und das andere die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsmagnetisierung in diesem

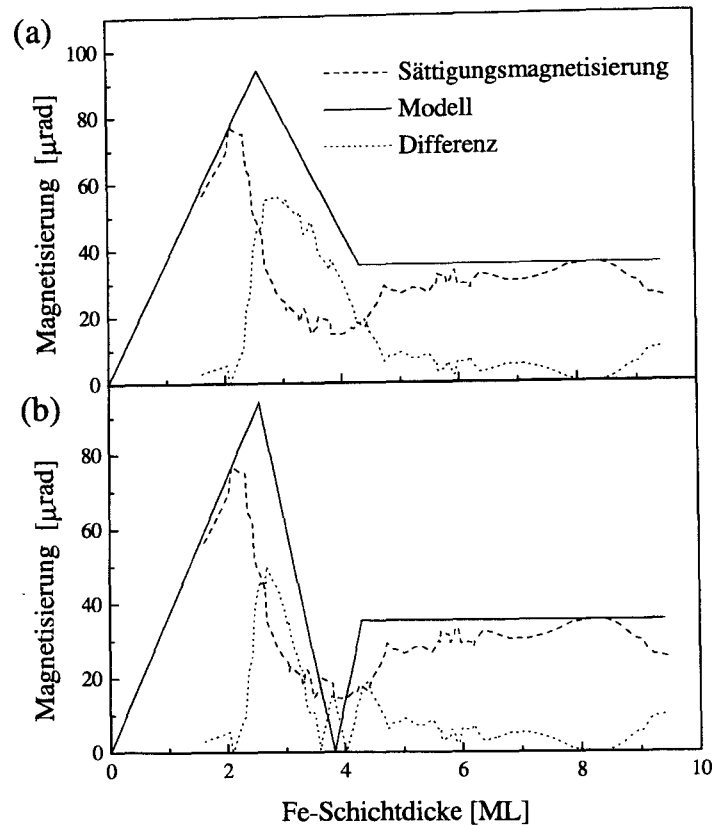


Abbildung 6.29: Vergleich der Sättigungsmagnetisierung mit zwei Erklärungsmodellen in Abhängigkeit von der Fe-Schichtdicke. Bei den Erklärungsmodellen wird ein linearer Übergang zwischen den beiden kfz-Phasen angenommen. (a) Die Magnetisierung beider Phasen überlagert sich additiv (durchgezogene Linie). Die Differenz beider Kurven entspricht der gepunkteten Linie. (b) Beide Phasen koppeln im Übergangsbereich antiferromagnetisch, d.h. die resultierende Magnetisierung ergibt sich aus dem Betrag der Differenz der beiden Phasen.

Bereich. Ein anderer wichtiger Punkt ist der Einfluß der Rauigkeit der Grenzfläche wie er durch die Streuung von H_f in den Abb. 6.20 und 6.25 sichtbar wird.

Wie im Anhang A gezeigt wird, ist das Auftreten des H_f eine Folge einer Austausch-anisotropie. Eine solche Austausch-anisotropie ist in der Regel mit dem Auftreten eines Antiferromagneten verknüpft. Die exotische Kombination eines Ferro- mit einem Fer-

rimagneten wird im Folgendem nicht berücksichtigt, da es sich bei solchen in der Regel um komplexere Strukturen wie Oxide oder Granate handelt [101]. Der 7 ML Ni-Film ist ein Ferromagnet. Dieses wird auch nicht durch eine eventuelle leichte Diffusion von wenigen Prozent Fe in den Ni-Film verändert [102]. Es ist also anzunehmen, daß es oberhalb von 2,3 ML Fe-Filmdicke antiferromagnetische Domänen innerhalb des Fe-Films gibt, wie dies in verschiedenen Arbeiten für die kfz Phase II gefunden wurde. Allerdings sind die Ergebnisse dieser Arbeiten teilweise umstritten [103]. Dagegen ist bei diesem Experiment die Existenz des Austauschisotropiefeldes ein eindeutiger Hinweis auf die Existenz einer antiferromagnetischen Phase.

Es ist dabei allerdings zu berücksichtigen, daß es sich bei der Austauschisotropie um eine besondere Art der Kopplung zwischen einem Ferromagneten und einem Antiferromagneten handelt, die im Ferromagneten nicht zu einer Verminderung der Magnetisierung führt, sondern deren Folge eben eine Verschiebung der Hysteresekurve im Ferromagneten ist (H_f). Es muß also einen anderen Abbaumechanismus geben. Eine Verminderung des MOKE-Signals durch die Diffusion von Ni in den Fe-Film und eine anschließende antiferromagnetische Kopplung scheidet hierbei ebenfalls aus, da Ni-Atome in einem Fe-Film ferromagnetisch koppeln [104].

Ein möglicher Ansatz zur Erklärung der Verminderung der Sättigungsmagnetisierung im Übergangsbereich zwischen dem ersten und zweiten kfz- Fe Schichtdickenbereich ergibt sich aus einem Vergleich mit granularen Systemen, wie z.B. dem System Ni-Fe/Ag/Cu(100) [105, 106]. Dies sind Systeme, die wie der Übergangsbereich lateral strukturiert sind. Neutronenstreuexperimente haben hier das Auftreten magnetischer Domänen mit unterschiedlicher Orientierung in Verbindung mit starken Frustrationseffekten gezeigt [106].

Solche Frustrationseffekte sind auch im Übergangsbereich zwischen Phase I und Phase II zu erwarten [80]. Durch diese Effekte sollte es dann analog zum NiFe/Ag-System zum Auftreten von in der Oberflächenebene beliebig orientierten Domänen kommen. Eine Magnetisierung, die senkrecht zum äußeren Feld in der Oberflächenebene liegt, ist allerdings mit der longitudinalen Kerr- Geometrie nicht meßbar. Hierzu wäre eine Messung des transversalen Kerr-Effekts notwendig, was allerdings aus geometrischen Gründen mit den vorhandenen Apparaturen nicht möglich ist. Wenn man mit einer transversalen Geometrie in diesem Bereich eine Magnetisierung messen könnte, wäre dieses allerdings ein deutlicher Hinweis auf diese Frustrationseffekte. Eine indirekte Möglichkeit ergibt sich allerdings über die Analyse der Form der Hysteresekurven. So

zeigen die Hysteresekurven in diesem Bereich einen für eine solche Konstellation, d.h. Verkipfung der Magnetisierung gegen das äußere Feld um 90° , typischen Verlauf [10]. Ein System mit einer größeren Anzahl frustrierter Spins würde auch die starke Abhängigkeit des Austauschisotropiefeldes und der Sättigungsmagnetisierung von den verschiedenen Präparationen erklären. So können geringe Änderungen der Präparationsbedingungen, die mit einer geringen Änderung der Grenzflächenrauigkeit und so der strukturellen Domänen verbunden sind, große Änderungen in der Form und Anordnung der magnetischen Domänen zur Folge haben. Außerdem gibt es für die Phase II eine Vielzahl von verschiedenen antiferromagnetischen Konfigurationen, die das magnetische Gesamtsystem unterschiedlich beeinflussen können [107].

Auch sind sowohl das Auftreten der Austauschisotropie als auch der biquadratischen Kopplung mit solchen frustrierten Systemen aufgrund einer erhöhten Grenzflächenrauigkeit verknüpft, wie im Anhang A gezeigt wird. Mit der Annahme, daß zusätzlich zur Austauschisotropie die biquadratische Kopplung auftreten wird, läßt sich insbesondere auch das in Abb. 6.15 beobachtete Temperaturverhalten von M_s für den 3,2 ML Fe-Film erklären. So wird die biquadratische Kopplung aufgrund des Proximity- Effekts sicherlich erst oberhalb der Néeltemperatur relevant werden, was die zusätzliche Abnahme der Magnetisierung in diesem Bereich erklären würde [108]. Wie sich anhand von Abb. 6.29 gezeigt hat, liegt das Maximum von H_f in der Mitte des Übergangsbereichs von der Phase I in die Phase II, d.h. bei der Schichtdicke für die die strukturelle Durchmischung maximal ist. Eine maximale strukturelle Unordnung und damit eine maximale Anzahl von Phasengrenzen scheint also zu einem maximalen Austauschisotropiefeld zu führen.

Es ist außerdem noch zu erwähnen, daß die Austauschisotropie und damit H_f nur in Systemen gefunden worden ist, die einer von den im Folgenden beschriebenen Prozeduren unterworfen worden sind. Bei der einen Präparation wird das System in einem in der Oberflächenebene liegenden Magnetfeld hergestellt. Bei der zweiten wird das System über die Néeltemperatur erwärmt und danach in einem äußeren Magnetfeld abgekühlt. Während der Präparation der Fe/Ni/Cu(001)- Schichten wurde keines der beiden verschiedenen Präparationsverfahren verwendet. Allerdings zeigt eine Abschätzung die Back et al. [109] für ein Fe/Cu/Co/Cu(001)- System vorgenommen haben, daß ein 7 ML dicker Co-Film ein Austauschfeld von der Größenordnung von ca. 2 T erzeugt und damit dazu führt, daß das Fe entgegen seiner senkrechten Oberflächenanisotropie in der Ebene magnetisiert ist. Ein solches Feld bewegt sich im Rahmen der üblicherweise

verwendeten Felder. Je nach System werden üblicherweise Felder zwischen 0,01 und 7 T verwendet [111].

Außerdem sind zur Deutung des hier gefundenen H_f auch die speziellen elektronischen Eigenschaften des Ni/Cu(001)- Substrats zu berücksichtigen, die sich von den Eigenschaften von z.B. Co/Cu(001) unterscheiden [112].

Neben der Beschreibung der magnetischen Eigenschaften muß ein Gesamtmodell auch in der Lage sein, die Unterschiede, die für M_s der Phase II der beiden Systeme Fe/Ni/Cu(001) und Fe/Cu(001) beobachtet wurden, erklären zu können. Diese Unterschiede sind das im Mittel kleinere auf die ML der ersten Phase normierte M_s (Abb. 6.28) und das Temperaturverhalten der Sättigungsmagnetisierung für die 5,3 ML Fe-Schicht (Abb. 6.21).

Wie schon im Abschnitt 6.3 festgestellt, beträgt M_s für das System Fe/Ni/Cu(001) in der Phase II im Mittel ca. 0,9 ML bei gleicher Magnetisierung wie Phase I und damit ca. 0,4 ML weniger als für Fe/Cu(001). Bei dem System Fe/Cu(001) ist, wie in Abschnitt 2.5 beschrieben, die gesamte Magnetisierung an der Oberfläche lokalisiert bzw. die Magnetisierung wird bei einer Oxidation der Oberfläche auf Null reduziert. Für verwandte Systeme mit einer magnetischen Unterlage wurde bei 300 K aber bisher nur an der Grenzschicht zwischen Fe-Film und magnetischen Substrat eine solche ferromagnetisch aktive Schicht gefunden [114–116], deren Dicke mit 0,5 bis 0,75 ML bestimmt wurde [114].

Bei den verwendeten magnetischen Unterlagen handelt es sich um Co-Filme mit einer Dicke von 10 ML und Ni-Filme mit einer Dicke von 15 ML. Bei diesen Schichtdicken ist die zu erwartende Rauigkeit der Substrat - Fe- Grenzfläche in der gleichen Größenordnung bzw. größer als bei dem hier untersuchten Fe/Ni/Cu(001)-System, so daß dieses Ergebnis auch für das hier untersuchte System zu erwarten ist.

Wie die LEED I(V)- Untersuchungen im Abschnitt 6.2.2 gezeigt haben, ist allerdings die Struktur für das Fe/Ni/Cu(001)- System und das Fe/Cu(001)- System in diesem Schichtdickenbereich identisch. Es kann also bei der aus dem System Fe/Cu(001) bekannten Korrelation von Magnetismus und Struktur, davon ausgegangen werden, daß auch das Fe/Ni/Cu(001)-System ein erhöhtes Moment an der Oberfläche besitzt. Hierbei ist allerdings auch die gleiche Curietemperatur zu erwarten (270 K). Bei der ferromagnetischen Schicht an der Grenzfläche ist von einer im Vergleich dazu erhöhten Curie-Temperatur analog zur Curie- Temperatur des Ni-Films von 420 K (Ref. [117]) auszugehen. Mit diesem Grenzflächenmagnetismus kann man die Magnetisierung der

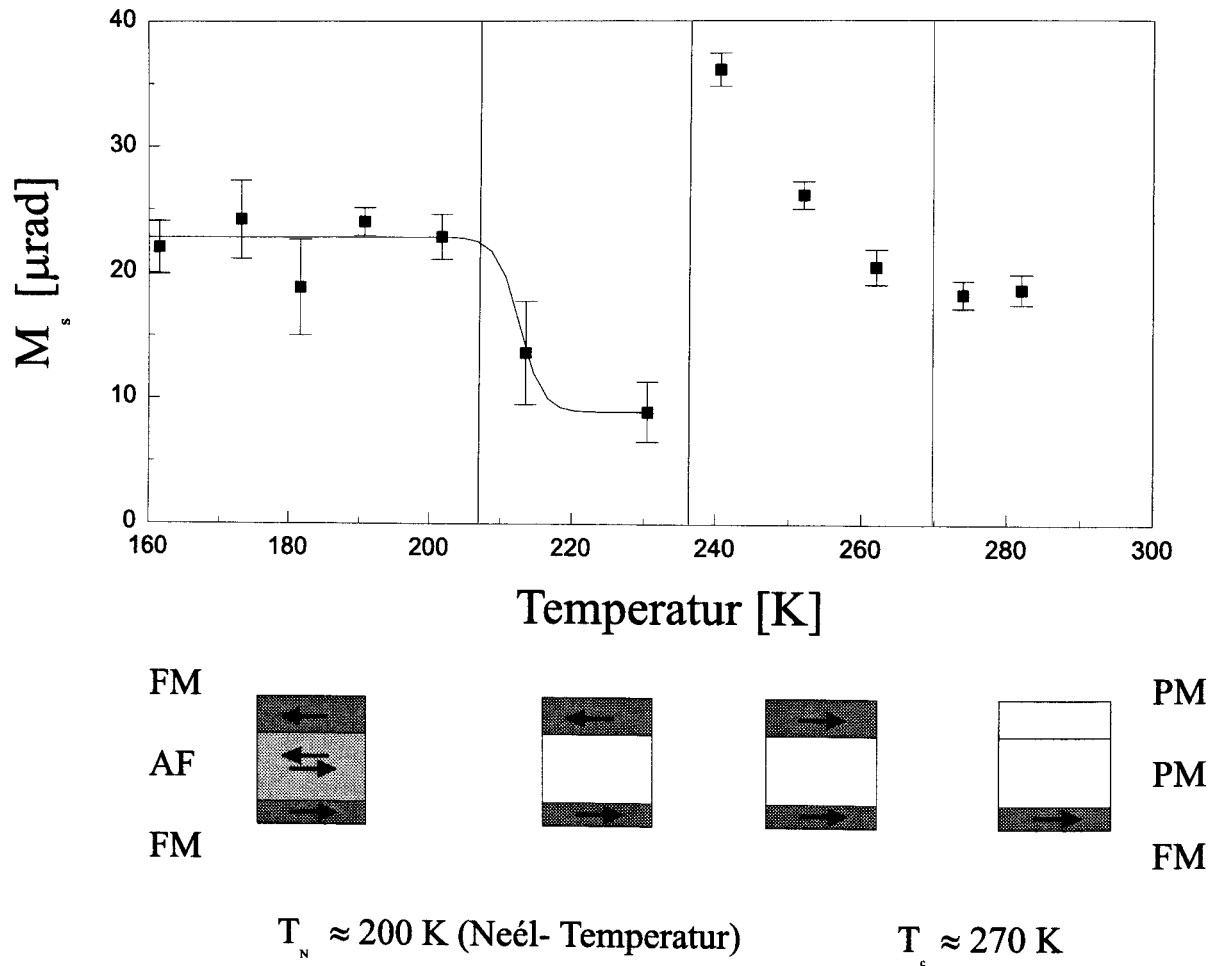


Abbildung 6.30: Modell für die Kopplung der verschiedenen Fe- Schichten des 5,3 ML dicken Films in Abhängigkeit von der Temperatur. Unterhalb der Néeltemperatur hat die biquadratische Kopplung kaum einen Einfluß. Bei 240 K geht die effektive Zwischenschichtkopplung von einer antiferromagnetischen in eine ferromagnetische Kopplung über.

Fe-Schicht im Schichtdickenbereich der Phase II bei 300 K erklären, wie man sie in den Abb. 6.21 und 6.26 findet. Diese Magnetisierung der ferromagnetischen Schicht an der Grenzfläche entspricht umgerechnet auf die Magnetisierung der ersten Phase zwischen 0,45 und 0,65 ML.

Mit Hilfe dieser Grenzschicht und einer Temperaturabhängigkeit der Zwischenschichtkopplung, wie sie schon beobachtet worden ist [118], läßt sich das in Abb. 6.30 dargestellte Modell für das Temperaturverhalten von M_s in diesem Bereich aufstellen.

Das Temperaturverhalten von M_s ergibt sich dabei aus einer Kombination von bilinearer und biquadratischer Kopplung. Im Bereich bis ca. 200 K (T_N) ist der bilineare Anteil dominant. Er führt zu einer antiferromagnetischen Kopplung der beiden ferromagnetischen Schichten. Oberhalb der Néeltemperatur nimmt die biquadratische Kopplung zu (Proximity-Effekt) [108]. Die biquadratische (90°)-Kopplung führt dazu, daß die effektive Magnetisierung in Richtung des äußeren Feldes abnimmt. Die beiden ferromagnetischen Schichten koppeln nach wie vor antiferromagnetisch.

Oberhalb von 240 K ändert sich aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Zwischenschichtkopplung die Kopplung zwischen den beiden Fe-Schichten von einer antiferromagnetischen zu einer ferromagnetischen. Es kann allerdings nicht aufgelöst werden, welcher Beitrag welche Temperaturabhängigkeit hat. Die ferromagnetische Kopplung bleibt bis zur Curietemperatur der oberen ferromagnetischen Schicht von ca. 270 K erhalten.

Zu einer vollständigen Interpretation des Kopplungsverhaltens in diesem Bereich bedarf es allerdings einer kombinierten Studie der Oberflächen- bzw. Grenzflächenmorphologie und des Mikromagnetismus bzw. der Kopplung einzelner Domänen in Abhängigkeit von der Temperatur wie es z.B. mit einer SPLEEM oder kombinierten STM und PEEM- bzw. SEMPA-Studie möglich wäre. Eine solche Studie könnte eine bessere Einsicht in die Temperaturabhängigkeit der bilinearen und der biquadratischen Kopplung geben. Bei einem Vergleich der Ergebnisse für das Fe/Ni/Cu(100) mit anderen Systemen [103, 109, 110] zeigt sich allerdings, daß auch andere Studien ein besonderes Temperaturverhalten für eine Fe-Schichtdicke von ca. 6 ML finden. Insbesondere die Arbeit von Würsch et al. [110] findet für die mit SPLEED gemessene Austauschasymmetrie A_{ex} bei der Temperatur von ca. 230 bis 240 K eine starke Änderung. Hierbei dient A_{ex} als eine Größe, die die Kopplung der beiden oberen Fe-Lagen zueinander beschreibt. Die Autoren dieser Arbeit interpretieren das Temperaturverhalten von A_{ex} und insbesondere die Änderung bei der Temperatur von ca. 230 K als eine Änderung der Kopplung der verschiedenen Fe-Lagen zueinander.

Zum Abschluß soll noch der Übergang zur krz-Phase diskutiert werden. Von dem System Fe/Cu(001) weiß man, daß die zweite kfz-Phase thermodynamisch instabil gegen eine Phasenumwandlung zur krz(110)-Phase ist. Die in den Abb. 6.26 und 6.27 dargestellten Untersuchungen zeigen, daß die Phase II sich für das Fe/Ni/Cu(001)-System analog zu den Ergebnissen, die sich aus den Fe/Cu(001)-System ergeben, verhält. Dies trifft insbesondere auf die Schichtdicke zu, bei der für vergleichbare Untersuchungen

(vergleichbar im Sinn der thermischen Behandlung des untersuchten Systems) das Auftreten der ersten krz-Domänen gezeigt wurde. Auch der Übergang von der Phase II in die krz- Phase III stellt sich analog dar. Hierbei ist der Anstieg von M_s und H_c allerdings außergewöhnlich steil. Die Ursache dafür kann in den Unterschieden zwischen der Phase II im Fe/Ni/Cu(001) und im Fe/Cu(001)-System liegen. Allerdings ist dabei auch zu berücksichtigen, daß eine Schichtdickenbestimmung für Schichtdicken größer 9 ML mit Hilfe einer Auger- Eichung ungenau wird (Abb.3.3). Das qualitative Verhalten von M_s und H_c ist allerdings sehr gut vergleichbar mit dem Fe/Cu(001)-System. Wobei sich das ausgeprägte Maximum durch ein zwei- Phasen- Modell erklären läßt, wie es in der Arbeit von Berger et al. [30] beschrieben wurde. Dieses zwei- Phasen- Modell erklärt auch die gefundene Form der Hysteresekurven, wie Studien an anderen zwei- Phasen- Systemen zeigen [100].

6.4 Fazit

In dieser Arbeit wurden das System Fe auf Ni/Cu(100) in einem Fe- Schichtdickenbereich bis 10 ML Fe untersucht. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Bestimmung des Einflusses eines ferromagnetischen Substrats auf die Struktur und den Magnetismus im Vergleich zum System Fe auf Cu(001). Bei diesem Vergleich wurde eine große Ähnlichkeit beider Systeme festgestellt. Bei den strukturellen Eigenschaften gibt es in der Übergangszone zwischen der (4x1)- und der (2x1)pm2g-Phase aber auch Unterschiede, die mit der erhöhten Grenzflächenrauigkeit und einer veränderten Grenzflächenenergie in Verbindung gebracht werden konnten. Bei magnetischen Eigenschaften sind die Unterschiede zwischen beiden Systemen weitaus ausgeprägter, insbesondere im Schichtdickenbereich zwischen 2,5 und 10 ML. Hier ist neben der Grenzflächenrauigkeit auch der Ferromagnetismus des Substrats von Bedeutung. Allerdings findet man im gesamten Schichtdickenbereich eine ausgeprägte Verknüpfung von Struktur und Magnetismus.

Die Ergebnisse der verschiedenen Untersuchungen sind in dem in der Abb. 6.31 gezeigten Modell dargestellt und zusammengefaßt. In diesem Modell erkennt man (zum Vergleich siehe z.B. das Modell für das Fe/Cu(001)-System in Abbildung 2.5), daß auch hier Fe in drei verschiedenen Modifikationen vorliegt. Es bildet sich kfz, ferro- und kfz, antiferromagnetisches Fe und krz, ferromagnetisches Fe aus. Diese drei ver-

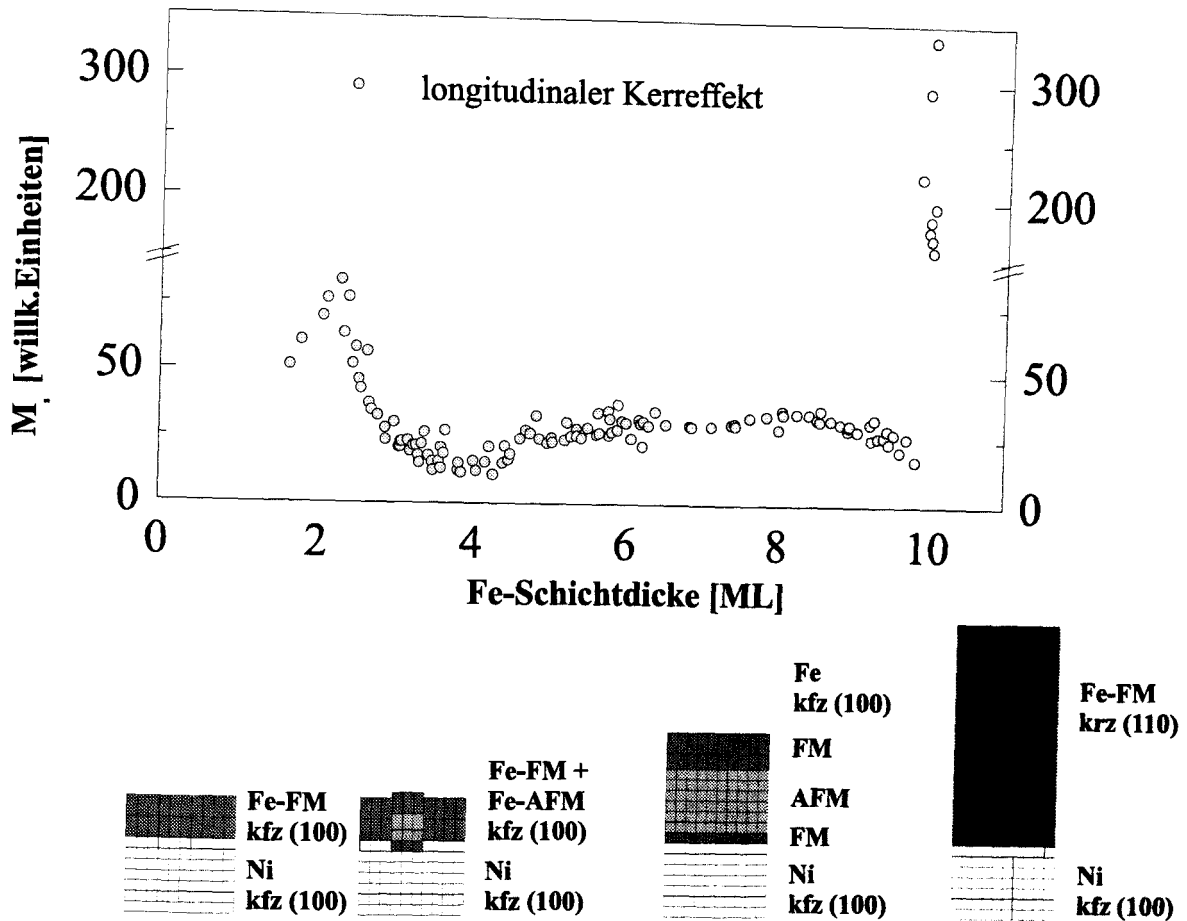


Abbildung 6.31: Modell für die Struktur und den Magnetismus des Fe/Ni/Cu(001)-Systems.

schiedenen Modifikationen bilden drei verschiedene Phasen ((4x1)-, (2x1)pm2g- und die kfs-Phase), die in der Fe- Schichtdickenabhängigkeit vier verschiedene Bereiche bilden. Der erste Bereich erstreckt sich von einer Fe-Filmdicke von 0 bis 2,5 ML. Hier haben wir eine homogen ferromagnetische, tetragonal verzerrte kfs-Fe-Struktur vorliegen, die durch eine (1x1)- und eine (4x1)-LEED Überstruktur gekennzeichnet wird. Diese Fe-Schicht ist ferromagnetisch mit der Ni-Unterlage gekoppelt, so daß die Magnetisierung im Gegensatz zu Fe auf Cu(001) in diesem Bereich in der Oberflächenebene und nicht senkrecht dazu liegt. Der zweite Bereich erstreckt sich von ca. 2,5 bis zu 4,5 ML. Es liegt hier ein Mischbereich vor, in dem die erste Phase, die durch die (4x1)-Überstruktur gekennzeichnet wird, und die zweite kfs- Phase, die durch eine (2x1)pm2g Phase ge-

kennzeichnet wird, zusammen auftreten.

Dieser Übergangsbereich hat seine Ursache zum Teil in der im Vergleich zum Fe/Cu(001)-System erhöhten Grenzflächenrauhigkeit, die zu einer größeren Fe-Filmrauhigkeit führt, so daß der für das System Fe/Cu(001) im Schichtdickenbereich zwischen 4 und 4,5 ML Fe gefundene Übergang auf einen größeren Bereich ausgedehnt wird. Allerdings wird auch die veränderte Grenzflächenenergie (Fe/Ni zu Fe/Cu) einen Beitrag leisten.

Dies führt dazu, daß in diesem Schichtdickenbereich der Fe-Film durch die verschiedenen (2x1)pm2g und (4x1)- Domänen lateral sowohl strukturell als auch magnetisch strukturiert ist. Man kann diese Modifikation leicht durch ein Tempern des Ni-Films vor der Deposition des Fe-Films verändern. Dieses ist allerdings durch die Diffusionseigenschaften des Cu-Ni-Systems begrenzt. Durch diese Strukturierung kommt es in diesem Bereich zu Frustrationseffekten zwischen den einzelnen magnetischen Domänen. Damit ist eine Beeinflussung der magnetischen Kopplungseigenschaften verknüpft, die aufgrund der für die verschiedenen Präparationen leicht unterschiedlichen Grenzflächenmorphologie einen Einfluß auf die magnetischen Eigenschaften in diesem Bereich zeigen.

Gleichzeitig kommt es zu einer Beeinflussung der Fe- Schicht durch die magnetischen und elektronischen Eigenschaften des darunter liegenden Ni- Bereichs. Es zeigt sich aber in diesem Schichtdickenbereich für alle untersuchten Proben ein durch die Austauschisotropie hervorgerufenen H_f . Dies ist ein eindeutiger indirekter Beweis für das Auftreten einer antiferromagnetischen Modifikation in diesem Schichtdickenbereich. Als das Austauschisotropiefeld erzeugender Mechanismus wirkt das Aufwachsen in einem Magnetfeld, daß sich hier aus dem Austauschfeld der Ni-Schicht ergibt.

Der dritte Bereich ist der Schichtdickenbereich zwischen 4,5 und 10 ML Fe. Das Wachstum und die Struktur in diesem Bereich ist mit der Struktur und dem Wachstum von Fe auf Cu(001) identisch. Analog zu Fe/Cu(001) findet man auch für Fe/Ni/Cu(001) in diesem Schichtdickenbereich ein annähernd konstantes M_s . Allerdings ist das Niveau von M_s im Vergleich zu Fe/Cu(001) deutlich kleiner. Auch findet man zwei verschiedene ferromagnetische Fe- Schichten. Eine befindet sich an der Oberfläche analog zu Fe/Cu(001) und eine an der Grenzfläche Fe zu Ni. Beide Schichten unterscheiden sich sowohl in ihrer Curietemperatur als auch in ihrer Magnetisierung. Im Bereich zwischen 4,5 und 10 ML koppeln die beiden Schichten bei einer Temperatur von 110 K antiferromagnetisch durch die Zwischenschichtkopplung (bilinearer Anteil). Außerdem

findet man zwischen 110 und 300 K eine Temperaturabhängigkeit der Kopplung der einzelnen Fe-Lagen zueinander, die durch die Temperaturabhängigkeit des bilinearen und biquadratischen Anteils an der Zwischenschichtkopplung erklärt werden kann.

Die zweite kfz- Phase ist, wie Untersuchungen zur Stabilität des Systems zeigen, thermodynamisch instabil gegenüber einer Umwandlung in die krz-Phase. Dieses Verhalten ist wiederum identisch mit dem Fe/Cu(001)-System. Der dritte Fe- Schichtdickenbereich beginnt ab einer Fe-Schichtdicke von ca. 10 ML. Man findet hier ebenfalls analog zum Fe/Cu(001)-System einen Übergang zur homogen magnetisierten krz-Fe-Phase. Dieser Übergang ist mit einem starken Anstieg von M_s und einem ausgeprägtem H_c -Peak verbunden, wie er sich in einem Übergangsbereich mit zwei verschiedenen Phasen ergeben kann. Für die Bildung der krz-Phase spielt die erhöhte Grenzflächenrauigkeit keine Rolle mehr.

Dieses Modell ergibt sich aus der Kombination der durchgeführten Auger-, MEED-, LEED-, LEED I(V)- und MOKE-Untersuchungen. Soweit möglich wurden Ergebnisse teilweise vergleichbarer Arbeiten herangezogen, um die Ergebnisse dieser Arbeit einzuordnen und zu untermauern. Es bleibt allerdings der Bedarf an einer Serie von orts- und schichtdickenaufgelösten magnetischen und strukturellen Untersuchungen bestehen, um das vorgestellte Erklärungsmodell zu verifizieren und zu konkretisieren. Insbesondere der Schichtdickenbereich zwischen 2,5 und 10 ML gibt die Möglichkeit zu einer expliziten Studie der Austauschisotropie und der Zwischenschichtkopplung.

Diese Ergebnisse zeigen, daß das Fe-System durch das magnetische Substrat beeinflusst wird. Wobei der direkte Einfluß an der Änderung der Magnetisierungsrichtung und der Verursachung der ferromagnetischen Fe- Schicht an der Fe/Ni-Grenzfläche und der damit verbundenen Kopplung zur Oberflächenlage sichtbar wird. Allerdings zeigt sich auch anhand der erhöhten Grenzflächenrauigkeit und veränderten Grenzflächenenergie im Vergleich mit dem Fe/Cu(001)-System, daß es experimentell sehr schwer ist, nur einen Parameter ohne eine Beeinflussung anderer Parameter zu verändern.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden mit Hilfe von volldynamischen LEED I(V)- Studien die strukturellen Eigenschaften von Fe/Cu₃Au(001), Mn/Cu₃Au(001) und Fe/Ni/Cu(001) untersucht. Ergänzend wurden mit Hilfe von magneto- optischer Kerr- Ellipsometrie die magnetischen Eigenschaften von Fe/Ni/Cu(001) charakterisiert. Das Ziel dieser Arbeit ist die Grenzen eines thermodynamischen Modells zur Beschreibung der funktionalen Eigenschaften (magnetische und strukturelle) dünner magnetischer Schichten zu bestimmen. Ein solches Modellsystem könnte es erlauben dünne Schichtsysteme mit maßgeschneiderten Eigenschaften herzustellen.

Zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften von Fe/Cu₃Au wurden LEED I(V)- Daten von Fe- Filmen der Schichtdicken 3,3 ML, 4,8 ML, 18,7 ML und 53 ML analysiert. Es konnte gezeigt werden, daß die Struktur aller vier Schichtdicken nicht pseudomorph ist. Die so ermittelten Strukturen wurden anschließend mit dem sich aus der Theorie der elastischen Verformung abgeleiteten Modell der epitaktischen Linie verglichen. Anhand dieses Modells und der bekannten ferromagnetischen Eigenschaften der Fe- Schichten wurden die Strukturen aller vier Schichtdicken als ferromagnetische krz- Strukturen identifiziert. Die Struktur der beiden dünnen Fe- Filme ist allerdings aufgrund der starken Verspannungen tetragonal verzerrt.

Eine Analyse der verschiedenen Beiträge zur Freien Energie zeigte, daß der Volumenbeitrag (Kombination aus dem Kristallstruktur- und dem Magnetismusbeitrag) und der Verspannungsenergiebeitrag die dominierenden Beiträge sind. Hierbei begünstigt der Kristallstrukturbeitrag die ferromagnetische krz- und der Verspannungsenergiebeitrag die ferromagnetische kfz- Struktur. Anhand des thermodynamischen Modells zur

Beschreibung der funktionalen Eigenschaften konnte gezeigt werden, daß insgesamt die krz- Struktur energetisch günstiger ist. Das Modell und das Experiment stimmen also sehr gut überein.

Für das System Mn auf Cu_3Au wurde die Struktur bei der Schichtdicke von 5,2 ML exakt bestimmt. Anhand dieser Analyse und der Analyse des 16 ML Films durch Y. Gauthier konnte gezeigt werden, daß Mn auf Cu_3Au im Schichtdickenbereich bis 20 ML in Abhängigkeit von der Schichtdicke in zwei unterschiedlichen tetragonal verzerrten kubischen Strukturen aufwächst. Die Übergangsschichtdicke zwischen den Strukturen beträgt 8 ML. Bei diesem Ergebnis überrascht sowohl, daß beide Strukturen pseudomorph sind, als auch, daß die Übergangsschichtdicke erstaunlich groß ist für den Übergang zwischen zwei pseudomorphen Strukturen. Auch ist die tetragonale Verzerrung der Struktur des 16 ML- Films mit 5% sehr groß. Ein Vergleich mit anderen Arbeiten zeigt, daß diese strukturellen Eigenschaften typisch für Mn- Filme auf Substraten mit Gitterparametern zwischen 2,65 und 2,89 Å sind.

Es zeigt sich, daß die tetragonalen Verzerrungen dieser Filme durch die Annahme einer gemeinsamen tetragonal-verzerrten Grundstruktur beschrieben werden konnten. Allerdings war es nicht möglich zu klären, wie sich trotz der auftretenden großen Verspannungsenergien die stark verspannten Mn- Filme stabilisieren können. Die Elastische Theorie ist nicht in der Lage diese großen Verspannungen zu beschreiben.

Es zeigt sich also, daß dieses System nicht geeignet ist, die Gültigkeit des thermodynamischen Beschreibungsmodells für die Bestimmung der Struktur von Mn auf $\text{Cu}_3\text{Au}(001)$ zu überprüfen. Die Ursache dafür liegt in der fehlenden Möglichkeit das elastische Verhalten schlüssig zu beschreiben. Auch liegt noch keine Theorie vor, die die Struktur von dünnen Mn- Filmen vollständig beschreibt.

Bei dem Studium des Systems $\text{Fe/Ni/Cu}(001)$ wurde untersucht, welchen Einfluß eine gezielte Modifikation der magnetischen Eigenschaften der Fe- Grenzfläche durch einen pseudomorphen 7 ML Ni- Film auf die aus dem $\text{Fe/Cu}(001)$ - System bekannten krz- Strukturen hat. Der Vergleich der strukturellen Eigenschaften zeigt eine große Übereinstimmung zwischen beiden Systemen. Im Schichtdickenbereich zwischen 2,5 und 4,3 ML findet man allerdings Unterschiede. In diesem Bereich ist der Fe- Film durch die Koexistenz von zwei krz- Fe- Phasen lateral struktuiert. Dieser Unterschied konnte durch eine erhöhte Grenzflächenrauigkeit in Verbindung mit einer veränderten Grenzflächenenergie erklärt werden.

Der Magnetismus beider Systeme zeigt in zwei Schichtdickenbereichen deutliche Un-

terschiede.

So ist im Übergangsbereich zwischen 2,5 und 10 ML der Magnetismus durch die laterale Strukturierung geprägt. Es treten zwischen den verschiedenen Domänen starke Kopplungseffekte (Grenzflächenaustauschkopplung (Austauschanisotropiefeld) und bi-quadratische Kopplung) auf. Auch zeigen sich für das Spinsystem starke Frustrations-effekte.

Im Schichtdickenbereich zwischen 4,3 und 10 ML beobachtet man, daß durch das Austauschfeld des Ni- Substrats eine zweite ca. 0,5 ML dicke ferromagnetische Schicht im Fe- Film induziert wird. Diese Schicht konnte anhand des Temperaturverhaltens der Sättigungsmagnetisierung identifiziert werden. Dabei wurde eine faszinierende Temperaturabhängigkeit der Zwischenschichtaustauschkopplung beobachtet werden.

Für das Fe/Ni/Cu(001)- System wurden Änderungen der strukturellen und magnetischen Eigenschaften im Vergleich zu Fe/Cu(001) gefunden. Diese Änderungen konnten durch die Modifizierung der Grenzfläche erklärt werden. Es zeigte sich, daß dazu nicht nur die Änderung des magnetischen Zustandes sondern auch die erhöhte Rauigkeit und die eigentliche Grenzflächenenergie berücksichtigt werden müssen.

Das Ziel der Arbeit war es das thermodynamische Modell zur Beschreibung der funktionalen Eigenschaften dünner magnetischer Filme zu testen und dabei die Grenzen der funktionalen Modifizierbarkeit zu bestimmen.

Diese Aufgabe konnte für die Systeme Fe/Cu₃Au und Fe/Ni/Cu(001) erfolgreich durchgeführt werden. Es zeigte sich beim Fe/Ni/Cu(001)- System allerdings auch, daß es hierbei nicht möglich ist einen einzigen Beitrag zur Freien Energie separat zu modifizieren.

Für das System Mn auf Cu₃Au(001) konnte die Überprüfung des thermodynamischen Modells nicht durchgeführt werden, da es nicht möglich war die elastischen Eigenschaften der Mn- Filme zu beschreiben.

Diese Ergebnisse zeigen, daß es in Zukunft zwei wichtige Aufgaben zu lösen gilt, um das Ziel der Planbarkeit von Eigenschaften dünner magnetischer Filme erreichen zu können. Das erste Ziel ist die Bestimmung des Einflusses von Grenzflächen auf magnetische Eigenschaften dünner Filme und das zweite die Klärung der Modifizierung der elastischen Eigenschaften an Grenz- und Oberflächen.

Anhang A

Magnetische Kopplung

Zum Verständnis des kollektiven Magnetismus, wie wir ihn u.a. in dünnen Schichten und Schichtsystemen finden, bedarf es dem Wissen über die verschiedenen magnetischen Kopplungsmechanismen im Festkörper. Die Grundlage für den kollektiven Magnetismus bildet die Austauschwechselwirkung [11]. Durch die Austauschwechselwirkung koppeln die Spins im Festkörper. Man unterscheidet zwischen direkter und indirekter Austauschwechselwirkung und damit auch zwischen direkten und indirekten magnetischen Kopplungen.

Die direkte Austauschwechselwirkung ist nur quantenmechanisch erklärbar (Pauli-Prinzip). Sie hat allerdings rein elektrostatischen Charakter. Sie wird durch den Überlapp der Wellenfunktionen der beteiligten Elektronen bestimmt. So tragen z.B. bei 4-f Elementen die Elektronen der 4-f Schale die Spins. Die Wellenfunktionen dieser Elektronen sind sehr stark lokalisiert. Die Kopplungsstärke der Austauschwechselwirkung fällt exponentiell mit dem Abstand der Elektronen voneinander ab. Es handelt sich daher hier um eine sehr kurzreichweitige Wechselwirkung.

Bei den indirekten Austauschmechanismen handelt es sich um eine Gruppe verschiedener Mechanismen. Dies sind z.B. die Rudermann- Kittel- Kasuya- Yosida- (RKKY-) Wechselwirkung, der Superaustausch und der Doppelaustausch. In einem Analogon zur Störungstheorie kann man sagen, daß sich die indirekte Austauschkopplung zur direkten verhält wie eine Störungstheorie der zweiten Ordnung zu einer Störungstheorie der ersten Ordnung. So ergeben sich für die RKKY- Kopplung und den Superaustausch effektive Hamilton- Operatoren vom Heisenbergtyp (bilinearer Typ $(\sim (\vec{S}_i * \vec{S}_j))$). Der Doppelaustausch wird allerdings durch einen Hamilton- Operator (biquadratischen

Typs ($\sim (\vec{S}_i * \vec{S}_j)^2$). Die RKKY- Kopplung kann in Abhängigkeit vom Abstand zu einer ferromagnetischen oder auch antiferromagnetischen Struktur führen. Dagegen hat der Doppelaustausch immer nur Ferromagnetismus zur Folge. Mit diesen verschiedenen Austausch- bzw. Kopplungsmechanismen läßt sich der kollektive Magnetismus im Festkörper für sehr unterschiedliche magnetische und elektronische Systeme beschreiben.

Bei den Untersuchungen der Kopplungsmechanismen in dünnen magnetischen Schichten wurden ebenfalls zwei Gruppen von Wechselwirkungen gefunden. Es handelt sich bei der einen um die Grenzflächenaustauschkopplungen (Austauschanisotropie) und bei der zweiten um die Zwischenschichtaustauschkopplungen. Beide Kopplungen sind Gegenstand intensiver aktueller Forschungen und für beide gibt es eine Vielzahl von einführenden Übersichtsartikel und Spezialliteratur (siehe z.B. die in diesem Abschnitt genannten Referenzen). Daher werden im Folgenden nur die wichtigsten Merkmale beider Kopplungen vorgestellt.

Außerdem sei an dieser Stelle erwähnt, daß beide Kopplungsmechanismen große technische Bedeutung haben. Aufbauend auf den Kopplungsmechanismen wurden in den letzten Jahren z.B. die Riesenmagnetowiderstand- Sensoren entwickelt.

A.1 Grenzflächenaustauschkopplung

Die Grenzflächenaustauschkopplung, die auch häufig Austauschanisotropie genannt wird, wird für Schichtsysteme gefunden, die eine Grenzfläche zwischen Ferro- und Ferromagnet, Ferro- und Antiferromagnet oder eine Ferri- und Antiferromagnet haben [101]. Diese Systeme zeigen aufgrund dieser Kopplung eine Reihe von charakteristischen Merkmalen.

1. Die Hysteresekurven sind bzgl. dem Nullfeld zu positiven oder negativen äußeren Feldern verschoben. Dieses Feld wird Bias- Feld oder Austauschanisotropiefeld genannt. Es existieren hierfür verschiedene Abkürzungen; in dieser Arbeit wird als Abkürzung für das Bias- Feld H_f verwendet.
2. Die Kopplung tritt nur unterhalb der Curie- und der Néeltemperatur der verschiedenen Schichten auf. Die Temperatur, bei der die Kopplung einsetzt, wird Blocking- Temperatur (T_B) genannt.

3. Die Kopplung wird nur in Systemen beobachtet, die entweder in einem äußeren Feld gewachsen oder in einem äußeren Feld unter die Blocking- Temperatur abgekühlt worden sind.
4. Die Kopplungsstärke nimmt proportional zur Schichtdicke des Ferromagneten ab.

Die Schichtdickenabhängigkeit des Effekts zeigt, daß es sich hierbei um einen reinen Grenzflächeneffekt handelt. H_f wurde zuerst als ein effektives Austauschfeld an der Grenze zwischen Ferro- und Antiferromagneten betrachtet. Es zeigte sich aber, daß H_f dafür allerdings um einen Faktor von ca. 100 zu klein ist [119]. Um dieses erklären zu können, wurde von der Beschreibung der Grenzfläche als einer ideal glatten Fläche zu einer Beschreibung einer realen d.h. rauhen Grenzfläche gewechselt. Hierbei kommt es an der Grenzfläche zu Kompensationseffekten. Dieses Modell mit einer rauhen Grenzfläche [119, 120] wird anhand neuerer experimenteller Ergebnisse [32, 121–123] zur Natur der Kopplung ständig verfeinert [124, 125]. Dabei wurde insbesondere die Spinanordnung an der Grenzfläche, die Temperaturabhängigkeit der Kopplung und die Abhängigkeit von strukturellen und magnetischen Ordnung (Domänengröße) an der Grenzfläche untersucht.

Diese neuen Experimente ergeben wichtige Ergebnisse, die zum tieferen Verständnis dieser Kopplung beitragen. Es zeigte sich unter anderem, daß an der Grenzfläche die Spins mit einer 90°- Verkipfung zueinander koppeln ([32, 123] und auch Abschnitt A.2). Auch handelt es sich bei der Temperaturabhängigkeit um keine strenge $\propto \frac{1}{T}$ Abhängigkeit [98, 99], im Gegensatz zu früheren Untersuchungen [126].

A.2 Zwischenschichtaustauschkopplung

Die Zwischenschichtaustauschkopplung wird in Systemen gefunden, in denen zwei ferromagnetische Bereiche durch einen para- oder einen antiferromagnetischen Zwischenbereich getrennt sind. Es kann sich hierbei um Schicht- [1] oder granulare Systeme handeln [127]. Das charakteristische Merkmal dieser Kopplung ist, daß das Vorzeichen der Kopplung von der Dicke der Zwischenschicht abhängt. Man beobachtet, daß die beiden ferromagnetischen Schichten in Abhängigkeit von der Zwischenschichtdicke ferromagnetisch bzw. antiferromagnetisch koppeln. (Anti-) Ferromagnetisch koppeln bedeutet hier, daß die Magnetisierungen in beiden Schichten (anti-) parallel liegen.

Es zeigt sich, daß es im wesentlichen zwei verschiedene Beiträge gibt, die diese Kopplung ausmachen. Diese sind zum einen ein bilinearer und zum anderen ein biquadratischer Term [108, 128]. Für die überwiegende Zahl der Systeme ist der bilineare Term dominant. Es handelt sich hierbei um eine der RKKY- Kopplung ähnliche Kopplung vom Heisenberg- Typ, d.h. die Kopplung ändert in Abhängigkeit vom Abstand der ferromagnetischen Bereiche das Vorzeichen und die Kopplungsstärke nimmt $\propto r^3$ ab. Dieser Beitrag wird durch eine „magnetische Polarisierung“ der Elektronen an der Fermifläche hervorgerufen. Die spezielle Form der Fermi- Fläche bestimmt die Oszillationsperioden. Bei dem zweiten Beitrag handelt es sich um den biquadratischen Beitrag. Dieser ist normalerweise kleiner als der bilineare Beitrag und führt so nur zu einer Störung der Periode mit der das Vorzeichen der Kopplung gemäß des bilinearen Beitrags oszilliert. Erst Arbeiten aus neuerer Zeit zeigen, daß es Systeme gibt in denen der biquadratische den bilinearen Beitrag dominiert [118]. Der biquadratische Beitrag wird wie die Grenzflächenaustauschkopplung auf die Rauigkeit der Grenzflächen im Mehrschichtsystem zurückgeführt. Auch führt der biquadratische Term wie die Grenzflächenaustauschkopplung zu einer 90° - Verkipfung der Spins.

Anhang B

MOKE-Versuch

Bei den verschiedenen Verfahren, die zu Messungen des magneto-optischen Kerr-Effekts erster Ordnung verwendet werden, handelt es sich um abgewandelte Verfahren der Ellipsometrie. Dabei haben sich zwei durchgesetzt: die sogenannte Null-Ellipsometrie und die Modulations-Ellipsometrie. Eine genaue Beschreibung der verschiedenen Methoden findet man in Ref. [48] und im Hinblick auf ihre Anwendung zur Messung des MOKE in Ref. [38]. Darüberhinaus gibt es eine Vielzahl von Publikationen, die sich mit verschiedenen Aspekten der Realisierung beschäftigen.

Für Untersuchungen an dünnen magnetischen Filmen im Bereich von wenigen Atomlagen ist es dabei insbesondere wichtig, eine möglichst große Empfindlichkeit und ein möglichst großes Signal zu Rauschverhältnis zu erreichen. Um das zu erreichen, ist es notwendig die verschiedenen Fehler- bzw. Rauschquellen identifizieren und gegeneinander gewichten zu können, um so das Experiment zu optimieren. Da es zur Durchführung der im Kapitel 6 gezeigten Messungen notwendig war das vorhandene MOKE- Experiment zu verbessern, wurde im Rahmen der Arbeit, das im Abb. 3.6 gezeigte Experiment neu aufgebaut und dazu eine Analyse möglicher Fehlerquellen durchgeführt. Diese Analyse wird im folgenden vorgestellt und anhand des neu aufgebauten Experiments diskutiert. Anhand der gemachten Erfahrungen wird die bei dem verwendeten Verfahren momentan mögliche Auflösungsgrenze aufgezeigt. Dementsprechend ist dieses Kapitel in zwei Abschnitte geteilt.

B.1 Fehlerbetrachtung

Man kann prinzipiell jede Abweichung des realen Stahlangangs vom idealen als einen Fehler betrachten (siehe z.B. Ref. [48]). Die hier vorgeführte Fehlerbetrachtung soll allerdings von den Meßgrößen ausgehen, die bei der Bestimmung der Kerr-Elliptizität relevant sind. Wie schon im Abschnitt 3.3 gezeigt, ergibt sich die Kerr-Elliptizität bei der Verwendung der Null-Ellipsometrie wie folgt:

$$\epsilon = \underbrace{\left(\frac{\Delta I}{\bar{I} - I_A} \right)}_K \frac{\Delta \Theta}{4} \quad (\text{B.1.B.1})$$

Hierbei ist I_A die Intensität, die an der Photodiode gemessen wird, wenn Polarisator und Analysator in Auslöschung stehen und kein äußeres Feld angelegt ist. Außerdem sollte der depolarisierende Einfluß durch die UHV-Fenster mit Hilfe des $\lambda/4$ -Plättchen kompensiert sein. Dies ist also die minimale Intensität. Diese Situation entspricht aufgrund der Kompensation nicht notwendigerweise einer Winkeldifferenz von exakt 90° zwischen dem Analysator und dem Polarisator [48]. \bar{I} ist die Intensität, die gemessen wird, wenn der Analysator gegen die Position der minimalen Intensität um einen Winkel $\Delta\Theta$ ausgelenkt wird. Dieses ist zur Messung von Hysteresekurven notwendig [49]. ΔI bezeichnet die Differenz zwischen dem eigentlichen Meßsignal, d.h. mit äußerem Magnetfeld, zum feldfreien Fall (also \bar{I}).

Um eine möglichst gute Auflösung erreichen zu können, muß sowohl der Quotient K als auch der Winkel $\Delta\Theta$ möglichst klein werden.

Die entscheidenden Komponenten dazu sind:

1. Lichtquelle
2. Optik (hiermit sind in erster Linie die Polarisatoren gemeint)
3. Verstelleinheiten (Drehversteller zur Justage der Polarisatoren und des $\lambda/4$ -Plättchens)
4. signalverarbeitende Elektronik

Dabei wurde vernachlässigt

1. Einfluß des Magnetfeldes auf die Optik (insbesondere die Fenster)

2. Linsenfehler u.a.

Es folgt eine Betrachtung der einzelnen Komponenten.

B.1.1 Lichtquelle

Das hauptsächliche Problem der Lichtquelle ist das Rauschen der Lichtintensität. Da bei diesem Experiment die Intensität die eigentliche Meßgröße ist (siehe Formel B.1.B.1). Die Kohärenzeigenschaften (örtlich und zeitlich) sind bei der Verwendung eines Gaslasers (z.B. He-Ne-Laser) kein Problem.

Das reale Meßsignal an der Photodiode lautet:

$$I_M[t, B(t)] = \bar{I}(t) + \Delta I[t, B(t)] \quad (\text{B.1.B.2})$$

Der Fehler in der Bestimmung von ΔI hängt sehr stark von dem Verhältnis $\frac{\Delta I}{\bar{I}}$ ab. In einer typischen Meßsituation ist \bar{I} deutlich größer als ΔI , d.h. der Quotient aus beiden beträgt 0,01 bis 0,1. Dieses führt bei einem Intensitätsrauschen des Lasers von max. 0,1 % über einen einzigen Meßzyklus zu einem Fehler von 1 bis 10 %. Dieser Fehler kann durch eine bessere Statistik d.h. mehrmaliges Wiederholen des Experiments deutlich verringert werden.

B.1.2 Optik (Polarisatoren)

Bei den Polarisatoren ergibt sich die hauptsächliche Fehlerquelle aus der Abweichung vom idealen Polarisator, d.h. die Intensität des durchgelassenen Lichtes bei paralleler Ausrichtung ist nicht exakt gleich eins im Verhältnis zum einfallenden Licht und genauso in Auslöschung nicht exakt null. Man nennt die Größe, die das reale Verhältnis zwischen der minimalen und der maximalen Intensität beschreibt, Extinktionsverhältnis. Dieses Verhältnis sollte möglichst klein sein. Der Fehler durch das Extinktionsverhältnis geht in die Bestimmung der Elliptizität direkt (Bestimmung von I_A) und indirekt (Festlegung von $\Delta\Theta$ und von $\bar{I}(\Delta\Theta)$) ein.

Dabei gilt für I_A :

$$I_A = I_o * \tilde{E}_X \quad (\text{B.1.B.3})$$

Hierbei bezeichnet I_o die maximale mögliche Intensität und \tilde{E}_X das Extinktionsverhältnis des gesamten Strahlengangs. Dieses Verhältnis ist im wesentlichen durch das Extinktionsverhältnis der Polarisatoren geprägt (eine Einschränkung dieser Aussage wird im folgendem Punkt vorgenommen). Es ist im allgemeinen aber größer, d.h. schlechter als das der Polarisatoren. Das Extinktionsverhältnis des gesamten Strahlengangs kann aber bei einer guten Kompensation das Extinktionsverhältnis der Polarisatoren fast erreichen.

Für $\bar{I}(\Delta\Theta)$ ergibt sich [49]:

$$\bar{I} = I_o \sin^2(\Delta\Theta) + I_A \quad (\text{B.1.B.4})$$

$$= I_o(\sin^2(\Delta\Theta) + \tilde{E}_X) \quad (\text{B.1.B.5})$$

Für $\Delta\Theta = 1,5^\circ$ ($0,15^\circ$) ergibt sich daraus $\sin^2(\Delta\Theta) = 5,55 \cdot 10^{-4}$ ($5,55 \cdot 10^{-6}$). Damit zeigt sich, daß $\Delta\Theta$ durch \tilde{E}_X (als untere Schranke) begrenzt wird. Weiterhin ist zu beachten, daß insgesamt der Quotient $K(\Delta\Theta)$ minimiert werden muß (Formel B.1.B.1).

B.1.3 Verstelleinheiten (Drehversteller)

Bei den Drehverstellern ergibt sich über die Einstellgenauigkeit ein Fehler bei der Bestimmung von $\Delta\Theta$ und bei der Justage der minimalen Intensität I_A .

Wenn α die Einstellgenauigkeit der Drehversteller ist, dann gilt unter der Annahme einer idealen Kompensation:

$$I_A = I_o * \underbrace{(\sin^2(\alpha) + E_X)}_{\tilde{E}_X} \quad (\text{B.1.B.6})$$

Es wird im Abschnitt B.2 betrachtet, welche Einschränkungen bei einem realen System für die Annahme der idealen Kompensation bestehen.

Für einen typischen Wert ($\alpha = 0,01^\circ$) ergibt sich $\sin^2(\alpha) = 2,47 \cdot 10^{-8}$, d.h. durch die Einstellgenauigkeit der Drehversteller erhalten wir eine weitere Limitierung des Extinktionsverhältnisses.

Für $\Delta\Theta$ ergibt sich aus der Einstellgenauigkeit der Drehversteller direkt der Fehler zu $2 \cdot \alpha$. Dies bedeutet bei Werten von ca. 1° für $\Delta\Theta$ und $0,01^\circ$ für α einen Fehler von ca. 2 %.

B.1.4 Signalverarbeitende Elektronik

Dieser Punkt ist in zwei Unterpunkte aufteilbar.

1. Photodiode
2. Meßelektronik

1. Photodiode:

(i) Eigentliche Photodiode

Man kann eine Photodiode (soweit es die MOKE-Anwendung betrifft) im wesentlichen durch vier verschiedene Kenngrößen beschreiben. Die dabei als typisch bezeichneten Werte gehören zu Photodioden, die als geeignet erscheinen.

1. NEP (noise equal power) (typ. $1 \cdot 10^{-15} \text{ W/Hz}^{1/2}$)
2. Dunkelstrom (typ. 1 bis 100 pA)
3. Empfindlichkeit (typ. 0,29 - 0,4 W/A)
4. Linearitätsbereich (typ. 10^{-12} - 10^{-3} W)

NEP und der Dunkelstrom sind Werte, die im wesentlichen das Eigenrauschen der Photodiode beschreiben und damit eine untere Grenze der meßbaren Strahlungsleistung darstellt. Die als Empfindlichkeit der Photodiode bezeichnete Größe beschreibt den Proportionalitätsfaktor für die Umwandlung von Licht in Strom durch die Photodiode. Dieser Faktor ist abhängig von der Wellenlänge des Lichts und dem Material aus dem die Photodiode besteht. Die oben angegebenen Werte gelten für eine Wellenlänge von 632,8 nm und für die Materialien Si (0,4 W/A) und GaAsP (0,29 W/A). Der Linearitätsbereich beschreibt den Bereich, in dem der Diodenstrom linear zur Intensität des eingefallenen Lichts steigt. Dieser Bereich ist mit dem maximalen Meßbereich identisch.

Dieses sind die Werte der Photodiode alleine und stellen die maximalen Grenzen für die Lichtmessung dar. Inwieweit das reale System diesen Werten entspricht, ist abhängig von der Verstärkungselektronik.

(ii) Verstärkungselektronik

Aus der Sicht des MOKE-Versuchs charakterisieren insbesondere zwei Größen die Verstärkungs- Elektronik:

1. Das Eigenrauschen der Elektronik.
Dieses Rauschen geht direkt in das Meßsignal ein.
2. Die Verstärkung.

Eine Verstärkungsschaltung einer Photodiode wandelt dabei typischerweise den Diodenstrom in eine Spannung um. Über die Verstärkungsspannung wird direkt das Meßsignal skaliert, daher ist eine Abstimmung der Verstärkung auf die nachfolgende Meßelektronik notwendig. Typische Werte für Verstärker-Schaltungen zu Photodioden erreichen Werte von $5 \cdot 10^6$ - 10^9 V/A.

2.Meßelektronik:

Auch zur Beschreibung der Meßelektronik bzgl. des MOKE-Versuchs gibt es im wesentlichen zwei Kenngrößen.

(i) Das Verhältnis \hat{V} . Es ist wie folgt definiert:

$$\hat{V} = \frac{U_K}{U_M} \quad (\text{B.1.B.7})$$

Hierbei beschreibt U_K die kleinste auflösbare Spannung und U_M die maximale meßbare Spannung. In Verbindung mit der Verstärkung durch die Verstärkungselektronik ergibt sich damit direkt die Auflösung durch die Elektronik. Die dabei maximal möglichen Grenzen ergeben sich aus den verwendeten AD-Bausteinen und der Versuchsstatistik.

(ii) Das Eigenrauschen

Es beschränkt zusammen mit dem Rauschen der Verstärkungselektronik U_K zu kleinen Werten hin.

B.2 Realsierung und Diskussion

Die in dem Abschnitt B.1 diskutierten Fehlerquellen lassen sich im wesentlichen durch eine Verwendung der dem Stand der Technik entsprechenden Komponenten (falls möglich) bzw. durch eine entsprechende Statistik des Versuchs minimieren.

Dabei sind, wie dieser Abschnitt gezeigt hat, die einzelnen Quellen unterschiedlich kritisch.

Das Rauschen der Lichtquelle ist unabhängig von anderen Fehlern und führt direkt zu einer Ungenauigkeit im Meßsignal. In diesem Experiment wurde ein intensitätsstabilisierter He-Ne-Laser verwendet, der über eine Zeitdauer von mehreren Stunden ein max. Rauschen von 0,1 % garantiert. Es ist dabei zu beachten, daß das Rauschen eines Gaslasers auf der Zeitskala von einigen Sekunden und Minuten (dies sind die für reale Messungen relevanten Zeitskalen) im wesentlichen durch das Netzrauschen der Spannungsversorgung erzeugt wird. Dieses könnte man durch eine zusätzliche Filterung bzw. falls möglich durch einen Batteriebetrieb vermindern [129]. Außerdem ergibt sich die Möglichkeit einer externen Stabilisierung durch eine externe Kavität [130], durch die man eine Verbesserung um den Faktor 2 erreichen kann.

Eine Betrachtung der verschiedenen optischen Elemente zeigt, daß sie nicht kritisch sind, wenn man gute Qualitäten verwendet. Für die Polarisatoren bedeutet dies ein garantiertes Extinktionsverhältnis kleiner als 10^{-7} . Es sind Qualitäten bis 10^{-8} erhältlich (solche wurden hier auch verwendet). Einen größeren Einfluß hat die Wahl der Drehversteller. Für Handdrehversteller liegt die beste erreichbare Auflösung bei $0,01^\circ$. Drehversteller, die eine solche Genauigkeit erlauben, wurden verwendet. Dadurch ergibt sich ein Fehler für die Bestimmung von $\Delta\Theta$ der direkt in die Formel B.1.B.1 eingeht. Wie oben gezeigt, ergibt sich dabei für die Messung von sehr dünnen Filmen für die ein $\Delta\Theta$ von $0,5$ bis 1° verwendet wird ein Fehler in der Größenordnung von bis zu ca. 4 %. Dieser Fehler kann nicht durch eine Statistik, die auf einem mehrmaligen Durchlaufen der Hysteresekurve beruht, herausgefiltert werden und ist nicht als Rauschen der Meßwerte identifizierbar. In der Ellipsometrie werden mit Motor gesteuerte Drehversteller mit einer Auflösung von besser als $0,001^\circ$ eingesetzt. Dadurch wäre außerdem eine weitgehende Automatisierung des Experiments möglich.

Bei einer Betrachtung der verschiedenen Komponenten der signalverarbeitenden Elektronik zeigt sich, daß es zwischen ihnen eine starke Abhängigkeit und Wechselwirkung gibt. Das Gesamtsystem muß dabei zwei verschiedene Anforderungen erfüllen. Das Verhältnis zwischen dem kleinsten aufzulösenden Signal und dem maximalen Meßwert muß möglichst groß sein und dieser maximale Meßwert sollte möglichst der Amplitude des gemessenen Signals entsprechen. Der erste Punkt kann erreicht werden, wenn man das reale Meßsignal I_M vor der Digitalisierung in die beiden Komponenten \bar{I} und ΔI zerlegt und nur die zweite Komponente digitalisiert. Dazu sollte dann ein möglichst hochauflösender AD-Wandler verwendet werden. Gleichzeitig sollte das Rauschen des Systems die Auflösung des AD-Wandlers nicht wesentlich überschreiten. Um den zwei-

ten Punkt zu optimieren, muß die Größe des Meßsignals über die Verstärkung bzgl. den Grenzen des AD-Wandlers skaliert werden. Hier wurde ein 12 bit AD-Wandler verwendet. Es bietet sich allerdings an, AD-Wandler mit einer Auflösung von 16 bzw. 18 bit zu verwenden. Bei der Realisierung des hier besprochenen Systems wurde ein Verhältnis von 1 zu 4000 (1 bit zu 12 bit) erreicht.

Für das gesamte Meßsystem ergab sich, wie im Abschnitt 3.3 gezeigt, bei Raumtemperaturmessungen eine Auflösung von $0,3 \mu\text{rad}$. Bei Tieftemperaturmessungen war die Auflösung deutlich schlechter. Sie betrug hier $1,8 \mu\text{rad}$. Der Grund für diese Beschränkung ergab sich durch einen Parameter, der bei den vorherigen Betrachtungen immer als ideal betrachtet wurde und zwar die Kompensation der depolarisierenden Effekte der UHV-Fenster, der Linse etc. durch das $\lambda/4$ -Plättchen. Die Kompensation ist nicht optimal, da sich durch eine leichte Vibration des Manipulators der exakte Strahlengang während der Messungen ständig ändert, wenn zur Kühlung der Probe Stickstoff durch den Manipulator gepumpt wird. Der Grund dafür liegt darin, daß der Manipulator für sechs verschiedene Freiheitsgrade der Translation und der Rotation ausgelegt und so die nötige Steifigkeit fehlt, um dies zu verhindern. Die Depolarisation des Lichts kann durch den Einbau von speziellen für die Licht-Spektroskopie vorgesehene UHV-Fenster verhindert werden.

So sollten prinzipiell, durch die Kombination der genannten Verbesserungen, Auflösungen bis zu ca. $0,1 \mu\text{rad}$ erreichbar sein und damit eine Auflösung die bisher nur mit Suszeptibilitätsmessungen erreicht wurde [46].

Literaturverzeichnis

- [1] P. Grünberg, Phys.Bl. **49**, 27 (1993) und Phys.Bl. **51**, 1077 (1995).
- [2] E. Bauer, Z. für Kristallographie **110**, 372 (1958).
- [3] H. Ibach, *Grenzflächenphysik, von der thermodynamischen Beschreibung zum atomistischen Verständnis*, Vorlesung, RWTH Aachen, (Sommersemester 1998).
- [4] M. Wuttig, Habilitationsschrift RWTH Aachen (1994).
- [5] R. C. Cammarata, Pro.Surf.Sci. **46**, 1 (1994).
R. C. Cammarata und K. Sieradzki, Appl.Phys.Lett. **55**, 1197 (1989).
- [6] H. Ibach, Surf.Sci.Rep. **29**, 193 (1997).
- [7] F. Jona und P.M. Marcus, Surf.Rev.Lett. **3**, 1285 (1996).
- [8] P.M. Marcus und F. Jona, Surf.Rev.Lett. **1**, 15 (1994).
- [9] H. Brune, Surf.Sci.Rep. **31**, 121 (1998).
- [10] G. Bertotti, *Hysteresis in Magnetism*, Academic Press, San Diego, London (1998).
- [11] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus, Teil2 Modelle*, Teubner, Stuttgart (1986).
- [12] M.D. Mermin und H. Wagner, Phys.Rev.Lett. **17**, 1133 (1966).
- [13] V.L. Moruzzi, P.M. Marcus, K. Schwarz und P. Mohn, Phys.Rev.B **34**, 1784 (1986),
V.L. Moruzzi, P.M. Marcus und J. Kübler, Phys.Rev.B **39**, 6957 (1989).

- [14] T. Asada und T. Terakura, Phys.Rev.B **46**, 13599 (1992) und **48**, 17649 (1993).
- [15] T. Asada und T. Terakura, Phys.Rev.B **47**, 15992 (1993).
- [16] B. Feldmann, Dissertation RWTH Aachen(1996).
- [17] M. Wuttig und B. Feldmann, Surf.Rev.Lett. **3**, 1473 (1996).
- [18] K.E. Johnson, D.D. Chambliss, R.J. Wilson und S. Chiang, Surf.Sci. **313**, L811 (1994).
D.D. Chambliss und K.E. Johnson, Surf.Sci. **313**, 215 (1994).
- [19] J. Thomassen, Dissertation RWTH Aachen (1993).
- [20] D. Li, M. Freitag, J. Pearson, Z.Q. Qiu und S.D. Bader, Phys.Rev.Lett. **72**, 3112 (1994).
- [21] W. Kuch, M.-T. Lin, K. Meinel, C.M. Schneider, J. Noffke und J. Kirschner, Phys.Rev.B **51**, 12627 (1995).
- [22] M. Zharnikov, A. Dittschar, W. Kuch, C. M. Schneider und J. Kirschner, Phys.Rev.Lett. **76**, 4620 (1996).
M. Zharnikov, A. Dittschar, W. Kuch, C. M. Schneider und J. Kirschner, J.Magn.Magn.Mat. **174**, 40 (1997).
- [23] S. Müller, P. Bayer, C. Reischl, K. Heinz, B. Feldmann, H. Zillgen und M. Wuttig, Phys.Rev.Lett. **74**, 765 (1995).
- [24] S. Müller, P. Bayer, A. Kinne, P. Schmaizl und K. Heinz, Surf.Sci. **322** (1995).
- [25] H. Landskron, G. Schmidt, K. Heinz, K. Müller, C. Stuhlmann, U.Beckers, M. Wuttig und H. Ibach, Surf.Sci. **256**, 115 (1991).
- [26] M. Wuttig und J. Thomassen, Surf.Sci. **282**, 237 (1993).
- [27] M. Wuttig, B. Feldmann, J. Thomassen, F. May, H. Zillgen, A. Brodde, H. Hanemann und H. Neddermeyer, Surf.Sci. **291**, 14 (1993).
- [28] W. Daum, C. Stuhlmann und H. Ibach, Phys.Rev.Lett. **60**, 2741 (1988).

-
- [29] J. Giergiel, J. Kirschner, J. Landgraf, J. Shen und J. Woltersdorf, *Surf.Sci.* **310**, 1 (1994).
 - [30] A. Berger, B. Feldmann, H. Zillgen und M. Wuttig, *J.Magn.Magn.Mat.* **183**, 35 (1998).
 - [31] T. Kraft, P.M. Marcus und M. Scheffler, *Phys.Rev.B* **49**, 11511 (1994).
 - [32] T.J. Moran, J. Nogués, D. Lederman und I.K. Schuller, *Appl.Phys.Lett.* **72**, 617 (1998).
 - [33] R.D. Ellerbrok, A. Fuest, A. Schatz, W. Keune und R.A. Brand, *Phys.Rev.Lett.* **74**, 3053 (1995).
 - [34] D.J. Keavney, D.F. Storm, J.W. Freeland, I.L. Grigorov und J.C. Walker, *Phys.Rev.Lett.* **74**, 4531 (1995).
 - [35] S. Müller, Dissertation Uni Erlangen-Nürnberg 1996.
 - [36] J. Thomassen, F. May, B. Feldmann, M. Wuttig und H. Ibach, *Phys.Rev.Lett.* **69**, 3831 (1992).
 - [37] B. Feldmann, Diplomarbeit RWTH Aachen (1991).
 - [38] P. Fumagalli, *Magnetooptik, Grundlagen und Anwendungen*, Vorlesung, RWTH Aachen, Wintersemester 1994/95.
 - [39] Z.Q. Qiu und S.D. Bader, *MRS Bulletin/October 1995* **20**, 34 (1995).
 - [40] P. Bruno, Y. Suzuki und C. Chappert, *Phys. Rev. B* **53**, 9214 (1996).
 - [41] G. Y. Guo und H. Ebert, *Phys. Rev. B* **51**, 12633 (1995).
 - [42] G. S. Krinchik und V. A. Artem'ev, *Soviet Phys. JETP* **26**, 1080 (1968).
 - [43] J. Zak, E.R. Moog, C. Liu und S.D. Bader, *Phys.Rev.B* **43**, 6423 (1991).
 - [44] J. McCord, Diplomarbeit Universität Erlangen-Nürnberg (1992).
 - [45] M. Straub, R. Vollmer und J. Kirschner, *Phys.Rev.Lett.* **77**, 743 (1996).
 - [46] S. Knappmann, Diplomarbeit Universität Münster (1994).

- [47] S. Arnold, M. Dunlavy und D. Venus, Rev.Sci.Instrum. **68**, 4212 (1997).
- [48] R. M. A. Azzam und N. M. Bashara, *Ellipsometry And Polarized Light*, North-Holland, Personal Library, Amsterdam (1996).
- [49] B. Gehring, Diplomarbeit RWTH Aachen (1993).
- [50] M. Henzler, Surf.Rev.Lett. **4**, 489 (1997).
J. Wollschläger, J. Falta und M. Henzler, Appl.Phys.A **50**, 57 (1990).
- [51] L. D. Clarke, *Surface Crystallography - An Introduction to the Low Energy Electron Diffraction*, Wiley, Chichester (1985).
- [52] M. Henzler und W. Göpel, *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Teubner, Stuttgart (1991).
- [53] W.Oed, Dissertation Universität Erlangen- Nürnberg (1990).
- [54] M. A. van Hove, W. H. Weinberg, C. M. Chan, *Low Energy Electron Diffraction*, Springer Ser. in Surf. Sci. Vol. 6, Springer, Berlin (1986).
- [55] K. Heinz, Prog. Surf. Sci. **27**, 239 (1988).
- [56] J.B. Pendry, J. Phys. C **13**, 937 (1980).
- [57] E. Zanazzi und F. Jona, Surf. Sci. **62**, 61 (1977).
- [58] G. Kleinle, W. Moritz und G. Ertl, Surf. Sci. **238**, 119 (1990).
- [59] W. Moritz, J. Phys. C **17**, 353 (1984).
- [60] H. Over, U. Ketterl, W. Moritz und G. Ertl, Phys. Rev. B **46**, 15438 (1992).
- [61] N. Bickel, Dissertation Universotät Erlangen- Nürnberg (1987).
- [62] V.L. Moruzzi, J.F. Janak, A.R. Williams, *Calculated Electronic Properties of Metals*, Plenum New York (1978).
- [63] A.M. Begley, S.K. Kim, F. Jona und P.M. Marcus, Phys.Rev.B **48**, 1786 (1993).
- [64] M.-T. Lin, J. Shen, W. Kuch, H. Jenniches, M. Klaua, C. M. Schneider und J. Kirschner, Phys. Rev. B **55**, 5886 (1997).

- [65] R. Rochow, C. Carbone, Th. Dodt, F. P. Johnen und E. Kisker, Phys. Rev. B. **41**, 3426 (1990).
- [66] B. Feldmann, B. Schirmer, A. Sokoll und M. Wuttig, Phys. Rev. B **57**, 1014 (1998).
- [67] B. Schirmer, B. Feldmann und M. Wuttig, Phys. Rev. B **58**, 4984 (1998).
- [68] J. Zarestky und C. Stassis, Phys.Rev.B **35**, 4500 (1987).
- [69] Eckerlin- Kandeler, *Landolt- Börnstein*, Band III/6, Kap.2.1 (1989).
- [70] A.S. Arrott, F. Jona und P.M. Marcus, J.Appl.Phys. **61**, 3721 (1987).
- [71] P. Schieffer, C. Krembel, M. C. Hanf, D. Bolmont und G. Gewinner, J. Magn. Magn. Mater. **165**, 180 (1997).
- [72] Y. U. Idzerda, B. T. Jonker, W. T. Elam und G. A. Prinz, J. Appl. Phys. **67**, 5385 (1990).
- [73] S. T. Purcell, M. T. Johnson, N. W. E. McGee, R. Coehoorn und W. Hoving, Phys. Rev. B **45**, 13064 (1992).
- [74] S. K. Kim, Y. Tian, M. Montesano, F. Jona und P. M. Marcus, Phys. Rev. B **54**, 5081 (1996).
- [75] D. Tian, S. C. Wu and F. Jona, Solid State Communications **70**, 199 (1989).
- [76] S. Andrieu, H. Fischer, A. Traverse und M. Piecuch, Phys. Rev. B **54**, 2822 (1996).
- [77] G.A. Prinz, J.Magn.Magn.Mat. **100**, 469 (1991),
V.L. Moruzzi und P.M. Marcus, *Energy band theory of metallic magnetism in the elements*, Band 7, Kapitel 2 97 Elsevier Science Publishers B.V. (1993).
- [78] B. Schirmer, B. Feldmann, A. Sokoll, Y. Gauthier und M. Wuttig, in Vorbereitung.
- [79] U. Zwicker, Z. Metallkunde **42**, 246 (1951).
- [80] S.Blügel, private Mitteilung
- [81] W.B. Pearson, *A handbook of lattice spacings and structures of metals and alloys*, International series of monographs in metal physics and physical metallurgy, Pergamon, Oxford (1967).

- [82] Y. Endoh und Y. Ishikawa, J. Phys. Soc. Jpn. **30**, 1614 (1971).
- [83] P. Schieffer, C. Krembel, M. C. Hanf und G. Gewinner, Phys. Rev. B **57**, 1141 (1998).
- [84] Ruqian Wu und A. J. Freeman, Phys. Rev. B **51**, 17131 (1995).
- [85] S. Andrieu, M. Finazzi, F. Yubero, H. M. Fischer, Ph. Arcade, F. Chevrier, L. Hennet, K. Hricovini, G. Krill und M. Piecuch, Europhys. Lett. **38**, 459 (1997).
- [86] D. J. Crockford, D. M. Bird, M. W. Long, J. of Phys.: Condensed Matter **3**, 8665 (1991).
- [87] P. Krüger, O. Elmouhssine, C. Demangeat und J. C. Parlebas, Phys. Rev. B **54**, 6393 (1996).
- [88] V. L. Sliwko, P. Blaha, P. Mohn und K. Schwarz, J. of modern Physics B **7**, 614 (1993).
- [89] Soon C. Hong, Miyoung Kim und A.J. Freeman, J. Appl. Phys. **83**, 7016 (1998).
- [90] U. Ramsperger, A. Vaterlaus, P. Pfäffli, U. Maier und D. Pescia, Phys.Rev.B **53**, 8001 (1996).
- [91] J. Shen, J. Giergiel und J. Kirschner, Phys.Rev.B **52**, 8454 (1995).
- [92] G. Bochi, C.A. Ballentine, H.E. Inglefield, C.V. Thompson, R.C. O’Handley, H.J. Hug, B. Stiefel, A. Moser und H.-J. Güntherodt, Phys.Rev.B **52**, 7311 (1995).
- [93] S.Z. Wu, G.J. Mankey, F. Huang und R.F. Willies, J.Appl.Phys. **76**, 6434 (1994).
- [94] S. Müller, B. Schulz, G. Kostka, M. Farle, K. Heinz und K. Baberschke, Surf.Sci. **341**, 235 (1996).
- [95] B. Schirmer und M. Wuttig, Surf.Sci. **399**, 70 (1998).
- [96] K. Heinz, S. Müller und P. Bayer, Surf.Sci. **337**, 215 (1995).
- [97] P.M. Oppener, T. Maurer, J. Sticht und J. Kübler, Phys.Rev.B **45**, 10924 (1992).

-
- [98] J. Fujikata, K. Hayashi, H. Yamamoto und M. Nakada, J.Appl.Phys. **83**, 7210 (1998).
- [99] S. Mao, N. Amin und E. Murdock, J.Appl.Phys. **83**, 6807 (1998).
- [100] R.Skomski, J.Appl.Phys. **76**, 7059 (1994),
R. Skomski und J.M.D. Coey, Phys.Rev.B **48**, 15812 (1993),
J.S.Jiang, E.E. Fullerton, M. Grimsditch, C.H. Sowers und S.D. Bader,
J.Appl.Phys. **83**, 6238 (1998).
- [101] W.H. Meiklejohn, J.Appl.Phys. **33**, 1328 (1962).
- [102] T. Böske, W. Clemens, C. Carbone und W. Eberhardt, Phys.Rev.B **49**, 4003 (1994).
- [103] R. Kläsges, Dissertation Uni Köln(1998).
- [104] B. Nonas, K. Wildberger, R. Zeller und P.H. Dederichs, Phys.Rev.Lett. **80**, 4574 (1998).
- [105] T.L. Hylton, K.R. Coffey, M.A. Parker und J.K. Howard, Science **261**, 1021 (1993)
K.R. Coffey, T.L. Hylton, M.A. Parker und J.K. Howard, Appl.Phys.Lett., 1579 (1993).
- [106] J.A. Borchers, P.M. Gehring, R.W. Erwin, J.F. Ankner, C.F. Majkrzak, T.L. Hylton, K.R. Coffey, M.A. Parker und J.K. Howard, Phys.Rev.B **54**, 9870 (1996).
- [107] T. Asada und S. Blügel, Phys.Rev.Lett. **79**, 507 (1997).
- [108] J.C. Slonczewski, J.Mag.Mag.Mat. **150**, 13 (1995).
- [109] C.H. Back, W. Weber, A. Bischof, D. Pescia und R. Allenspach, Phys.Rev.B **52**, R13114 (1995).
- [110] Ch. Würsch, C.H. Back, L. Bürgi, U. Ramsperger, A. Vaterlaus, U. Maier, D. Pescia, P. Politi, M.G. Pini und A. Rettori, Phys.Rev.B. **55**, 5643 (1997).
- [111] S.S.P. Parkin, V.R. Deline, R.O. Hilleke und G.P. Felcher, Phys.Rev.B **42**, 10583 (1990).

- [112] K. Wildberger, P. Lang, L. Nordström, R. Zeller und P.H. Dederichs, *J.Magn.Magn.Mat.* **165**, 454 (1997).
- [113] W.L. O'Brien, T. Droubay und B.P. Tonner, *Phys.Rev.B* **54**, 9297 (1996).
- [114] W.L. O'Brien und B.P. Tonner, *Phys.Rev.B* **52**, 15332 (1995).
- [115] Ernesto J. Escorcia-Aparicio, R.K. Kawakami und Z.Q. Qiu, *J.Appl.Phys.* **79**, 4964 (1996) und *Phys.Rev.B* **54**, 4155 (1996).
- [116] R. K. Kawakami, Ernesto J. Escorcia-Aparicio und Z.Q. Qiu, *J.Vac.Sci.Technol.B* **14**, 3164 (1996).
- [117] F. Huang, M.T. Kief, G.J. Mankey und R.F. Willies, *Phys.Rev.B* **49**, 3962 (1994).
- [118] K. Pettit, S. Gider, S.S.P. Parkin und M.B. Salamon, *Phys.Rev.B* **56**, 7819 (1997).
- [119] A.P. Malozemoff, *Phys.Rev.B* **35**, 3679 (1987).
- [120] A.P. Malozemoff, *Phys.Rev.B* **37**, 7673 (1988).
- [121] J. Nogués, D. Lederman, T.J. Moran und I.K. Schuller, *Phys.Rev.Lett* **76**, 4624 (1996).
- [122] K. Takano, R.H. Kodama, A.E. Berkowitz, W. Cao und G. Thomas, *J.Appl.Phys.* **83**, 6888 (1998).
- [123] Y. Ijiri, J.A. Borchers, R.W. Erwin, S.-H. Lee, P.J. van der Zaag und R.M. Wolf, *Phys.Rev.Lett.* **80**, 608 (1998).
- [124] N.C. Koon, *Phys.Rev.Lett.* **78**, 4865 (1997).
- [125] T.M. Hong, *Phys.Rev.B* **58**, 97 (1998).
- [126] C. Tsang und K. Lee, *J.Appl.Phys.* **53**, 2605 (1982).
- [127] A.E. Berkowitz, J.R. Mitchell, M.J. Carey, A.P. Young, S. Zhang, F.E. Spada, F.T. Parker, A. Hütten und G. Thomas, *Phys.Rev.Lett.* **68**, 3745 (1992).
J.Q. Xiao, J.S. Jiang, C.L. Chien, *Phys.Rev.Lett.* **bf**, 3749 (1992).

-
- [128] K.B. Hathaway, *Ultrathin Magnetic StructuresII*, 45 Eds. B. Heinrich, J.A.C. Bland, Springer- Verlag Berlin etc. (1994).
- [129] J.A.C. Bland, M.J. Padgett, R.J. Butcher und N. Bett, J.Phys.E **22**, 308 (1989).
- [130] F.O. Schumann, Disseration Universität Cambridge (1994).

Danksagung

Prof.Dr. H. Ibach danke ich für die Möglichkeit diese Dissertation am Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik durchführen zu können.

Prof.Dr. M. Wuttig danke ich besonders für die Betreuung dieser Arbeit und die vielen interessanten und produktiven Diskussionen, die maßgeblich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen haben.

Petra Franz, Inés Friedrich, Marc Henke, Josef Larscheid, Volker Weidenhof, Han- Willem Wöltgens, Prof. Gao- Xiang Ye, Sun- Joung You und Stefan Ziegler danke ich für das gute Arbeitsklima in der Gruppe und die großen und kleinen Hilfen, mit denen sie das Fortschreiten dieser Arbeit unterstützt haben.

Dr. Yves Gauthier danke ich für die Einführung in die Analyse von LEED I(V)- Kurven und die vielen Hilfen mit denen er mich unterstützt hat.

U. Linke danke ich für die Präparation der Einkristalle und seine vielen nützlichen Tips.

Den Mitarbeitern der mechanischen und elektronischen Werkstatt danke ich für ihre Hilfen, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Herrn Rausch und Herrn Schiffer gilt dabei mein besonderer Dank für ihre tatkräftige Unterstützung beim Aufbau des MOKE- Versuch und Umbau der LEED- Elektronik.

Allen anderen Mitarbeitern des Instituts danke ich für ihre wohlwollende Aufnahme und ihre Unterstützung.

Mein besonderer Dank gilt auch Inés Friedrich und Volker Weidenhof für die kritische Durchsicht dieser Arbeit.

Auch danke ich meinen Eltern und Brüdern für ihre Unterstützung während der Zeit der Promotion.

Forschungszentrum Jülich



Jül-3641
März 1999
ISSN 0944-2952